

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования  
«Уральский государственный лесотехнический университет»

На правах рукописи

Латыпов Илья Фанильевич

**Развитие волновой модели формирования кристаллов новой фазы при  
мартенситных превращениях в металлах и сплавах**

01.04.07 - Физика конденсированного состояния

Диссертация на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель  
доктор физико-математических наук, доцент  
Чащина Вера Геннадиевна

Екатеринбург – 2017

## Оглавление

Введение.....	4
Глава 1. Информация, важная для постановки задач исследования.....	13
1.1 Характерные особенности морфологии и кинетики спонтанных мартенситных превращений.....	13
1.2 Основные положения динамической теории гетерогенного зарождения и волнового роста мартенситного кристалла.....	15
1.3 Динамическая модель формирования регулярной структуры двойников превращения.....	17
1.4 1.4. Задачи исследования.....	24
Глава 2. Модуляция соотношения компонент двойников превращения, обусловленная реальным соотношением скоростей волн в составе управляющего волнового процесса.....	26
2.1 Вводные замечания.....	26
2.2 Примеры реальных структур двойников превращения.....	27
2.3 Аппроксимация закона дисперсии s-волн и оценка разности скоростей волн на примере сплава Fe-30%Ni.....	30
2.4 Пороговые условия деформации и качественная картина формирования модулированной ДС.....	32
2.5 Оценка числа кристалликов основной компоненты ДС, порождаемых единственной спонтанно активированной ячейкой.....	34
2.6 Заключение к главе 2.....	37
Глава 3. Наследование тензора деформации упругого поля дислокационного центра зарождения управляющим волновым процессом.....	40
3.1 Вводные замечания.....	40
3.2 Тензор деформации, сопоставляемый волновому процессу, управляющему ростом мартенситного кристалла при волновых нормалях, лежащих в плоскости симметрии $(110)_c$ .....	42
3.3 Связь между отношениями деформаций и скоростей управляющих волн в наиболее общем случае непараллельных векторов $\xi_i$ и $n_i$ и алгоритм проверки возможности наследования тензора деформации упругого поля ДЦЗ управляющим волновым процессом.....	46
3.4 Наследование упругого поля ДЦЗ при В2-В19 МП в сплаве TiNiCu.....	47
3.4.1. Данные расчета упругого поля ДЦЗ в форме прямоугольной петли с вектором Бюргерса $[100]_c$ смешанной ориентации относительно основного сегмента петли $[1\bar{1}0]_c$ .....	48
3.4.2. Отыскание управляющего волнового процесса, наследующего тензор деформации поля ДЦЗ.....	50
3.5 Наследование тензора деформации упругого поля ДЦЗ управляющим волновым процессом в железо-никелевом сплаве.....	52
3.5.1. Вводные замечания.....	52

3.5.2. Данные расчета упругого поля ДЦЗ в форме прямоугольной петли с вектором Бюргера $[01\bar{1}]_{\gamma}$ смешанной ориентации относительно основного сегмента петли $[11\bar{2}]_{\gamma}$ .....	53
3.5.3. Обсуждение результатов.....	56
3.6 Заключение к главе 3.....	57
Глава 4. Идентификация ДЦЗ кристаллов с габитусами типа $(hh\ell)$ при нетипичном соотношении индексов Миллера $h>\ell$ и уточнение правил морфологического перехода от кристаллов с габитусами $\{557\}_{\gamma}$ к $\{225\}_{\gamma}$ .....	60
4.1 Вводные замечания.....	60
4.2 Дислокационные центры, инициирующие формирование кристаллов мартенсита охлаждения с габитусами $\{233\}_{\gamma}$ и $\{31010\}_{\gamma}$ .....	62
4.3 Формирование дополнительной компоненты бейнитного феррита с габитусом, близким $(774)_{\gamma}$ .....	67
4.4 Интерпретация с позиций динамической теории морфологического перехода от габитусов $\{557\}_{\gamma}$ к $\{225\}_{\gamma}$ при ГЦК-ОЦТ мартенситном превращении.....	71
4.4.1. Вводные замечания.....	71
4.4.2. Трактовка концентрационной зависимости $\{557\}_{\gamma} \rightarrow \{225\}_{\gamma}$ перехода в динамической теории.....	72
4.4.3. Трактовка $\{557\}_{\gamma} \rightarrow \{225\}_{\gamma}$ перехода при высоких скоростях закалки в динамической теории.....	73
4.4.4. Упругие поля ДЦЗ при краевой ориентацией вектора Бюргера по отношению к сегменту $[1\bar{1}0]_{\gamma}$ дислокационной петли скольжения и выполнении условия $\varepsilon > \varepsilon_c$ .....	74
4.4.5. Обсуждение результатов.....	77
4.5 Заключение к главе 4.....	79
Заключение.....	81
Список сокращений.....	85
Список литературы.....	86
Приложение А. Алгоритм восстановления волновых нормалей управляющих волн.....	104
Приложение Б. Расчетная информация характеристик упругого поля ДЦЗ.....	111

## Введение

### Актуальность темы.

Мартенситные превращения (МП) являются важным примером кооперативных структурных перестроек в твердых телах. МП сопровождаются существенным изменением физических свойств материалов и поэтому широко используются при термомеханической обработке. В большинстве случаев МП обладают признаками фазовых переходов I рода. Если группы симметрии начальной и конечной фаз не связаны соотношением соподчинения (случай реконструктивных МП), то признаки переходов I рода проявляются наиболее ярко. Если же осуществляется переход с формированием новой фазы, симметрия решетки которой является подгруппой исходной фазы (случай дисторсионных МП), то МП может протекать как переход первого рода близкий к переходу II рода. Неизменный интерес вызывают физические механизмы реализации МП. Следует отметить, что большинство проблем, связанных с особенностями реконструктивных МП удалось решить только после создания динамической теории МП, развитой в работах М.П. Кащенко и его соавторов. В основе теории лежит представление о начальном возбужденном состоянии (НВС), возникающем в определенных областях исходной фазы с пониженным значением межфазного барьера, обусловленного наложением упругого поля дефекта (как правило, дислокационной природы). Колебательный характер НВС порождает управляющий волновой процесс (УВП), распространение которого сопровождается потерей устойчивости решетки исходной фазы. Эта концепция привела к успешному описанию наблюдаемых морфологических признаков при прямых  $\gamma$ - $\alpha$  (ГЦК-ОЦК или ОЦТ) МП и обратных МП в сплавах железа, ОЦК-ГПУ МП в титане, B2-B19 МП в Ti-Ni и ряде других сплавов. Существенно также, что сопоставление расчетных и наблюдаемых признаков позволяет идентифицировать

дислокационные центры зарождений (ДЦЗ) отдельных кристаллов мартенсита. В связи с успехами динамической теории ее актуальность, с одной стороны, обуславливается целесообразностью расширения приложений теории в рамках сложившейся методологии, а с другой стороны, необходимостью развития методологии с целью детализации описания наблюдаемых особенностей превращения, включая и дисторсионные МП. Заметим, что такой важный феномен как эффект памяти формы чаще всего наблюдается в материалах с дисторсионными МП. В связи с этим представляет интерес проанализировать возможность наследования упругого поля ДЦЗ в области локализации НВС управляющим процессом. Еще одна интересная проблема связана с анализом динамических сценариев формирования реальных структур двойников превращения.

#### **Степень разработанности темы исследования**

Принципиальное решение проблемы формирования регулярной структуры двойников превращения в сверхзвуковом режиме в рамках динамической теории было получено при включении в состав УВП относительно коротковолновых смещений (переносимая  $s$ -волнами), тогда как относительно длинноволновая деформация (переносимая  $\ell$ -волнами) отвечала за формирование ориентировок плоских границ кристалла (габитусных плоскостей). Полученное при таком анализе строгое соотношение между скоростями  $s$ - и  $\ell$ -волн требует верификации по отношению к конкретным материалам. Следует ожидать, что отклонение от подобного соотношения должно привести к нерегулярности двойниковой структуры (ДС). Механизм, обеспечивающий эффект памяти формы, связан с возможностью высокой степени обратимости МП. В рамках динамической теории это означало бы в качестве необходимого (но недостаточного) условия наследование управляющим волновым процессом упругого поля ДЦЗ. Такая задача в динамической теории не ставилась и требует рассмотрения.

## Цель работы

Основная цель работы заключается в развитии динамической теории МП применительно к проблемам формирования реальных ДС и наследования упругих полей ДЦЗ волновым процессом, управляющим ростом мартенситных кристаллов. Кроме того, в рамках отработанной методологии представляет интерес идентификация ДЦЗ кристаллов мартенсита охлаждения, возникших вслед за предварительной пластической деформацией.

Указанные цели определяют следующие задачи исследования.

1. Учет влияния дисперсии s-волн на соотношение между скоростями s- и  $\ell$ -волн, соответствующее формированию регулярной ДС;
2. Исследование влияния рассогласования скоростей s- и  $\ell$ -волн на формирование ДС;
3. Формулировка алгоритма отыскания УВП, наследующего тензор деформации упругого поля ДЦЗ в области локализации НВС;
4. Проверка возможности наследования упругого поля ДЦЗ управляющим процессом на примере конкретных систем.
5. Идентификация ДЦЗ для нетипичного варианта мартенсита охлаждения, возникшего после предварительной пластической деформации.

## Научная новизна

Впервые получены следующие результаты.

1. Для системы Fe-30Ni выполнена аналитическая интерполяция закона дисперсии фононов вдоль направления  $\Delta$  ( $\Gamma$ -X) в первой зоне Бриллюэна и показано (на примере сплава Fe-30Ni), что отклонение от нуля разности  $\Delta v$ , характеризующей рассогласование скоростей s- и  $\ell$ - волн, на величину  $\approx 0.11v_s$  ( $v_s$ - величина скорости s-волн) приводит к переходу от

регулярной к фрагментированной ДС. Причем каждый из фрагментов должен порождаться своей спонтанно активированной  $s$ - $\ell$  ячейкой.

2. Предложено характеризовать размеры фрагментов с помощью числа  $N_{bas}$  – количества основных компонент в ДС фрагмента.  $N_{bas}$  определяется условием равенства ширин основной и двойниковой компонент ДС. Показано, что величина  $N_{bas}$  существенно зависит от области локализации спонтанно активированной  $s$ - $\ell$  ячейки внутри фронта УВП.

3. На основе требований совпадения тензоров деформации, сопоставляемых упругому полю ДЦЗ в области локализации НВС и УВП, соответственно, предложен алгоритма отыскания УВП, наследующего тензор деформации упругого поля ДЦЗ. Такое наследование естественно ведет к совпадению ориентаций габитусных плоскостей, задаваемых УВП, со слабоискаженными (в предельном случае инвариантными) плоскостями упругого поля ДЦЗ. Для титана и сплава Fe-31Ni найдены характеристики УВП, наследующих тензоры деформации упругих полей ДЦЗ в случаях идентифицированных ранее ДЦЗ.

4. Для мартенита охлаждения, наблюдаемого после предшествующей пластической деформации, ориентировка габитусных плоскостей  $(233)_\gamma$ , в рамках методологии динамической теории МП, проинтерпретирована как следствие образования ДЦЗ в форме относительно узких прямоугольных петель с основными сегментами линий  $[1-10]_\gamma$  и векторами Бюргерса  $\mathbf{b} \parallel \langle -311 \rangle_\gamma$ .

5. Механизм образования кристаллов с нетипичными габитусами  $(233)_\gamma$  связывается с наиболее быстрой трансформацией плоскостей  $\{110\}_\gamma$  аустенита, ведущей к материальным ориентационным соотношениям, близким к соотношениям Нишиямы. Показано, что отбор в пользу габитусов  $(233)_\gamma$ , по сравнению с типичными габитусами  $(557)_\gamma$ , достигается при использовании комбинированного фактора, равного произведению величин сдвига и относительного изменения объема.

Близкий, по сути, отбор имеет место и для нетипичных габитусов (774)<sub>γ</sub> субреек в макропластине бейнитного феррита.

### **Методология и методы исследования**

Работа выполнена в рамках динамической теории мартенситных превращений. Центральную роль в теории быстрого формирования кристаллов играет концепция НВС. НВС локализуются в определенных областях решетки исходной фазы, симметрия которой нарушается упругим полем дефектов, снижающим межфазный барьер. В связи с этим методология в качестве необходимого этапа исследований включает расчет упругих полей дефектов (как правило, отдельных дислокаций или их ансамблей) с последующим отбором областей, благоприятных для локализации НВС. Колебательный характер НВС позволяет определить наиболее вероятные направления волновых нормалей волн, управляющих ростом мартенситного кристалла и рассчитать ожидаемые морфологические признаки. При совпадении результатов расчета с экспериментальными данными можно с большой степенью вероятности идентифицировать дефекты, играющие роль центров зарождения.

При описании тонкой структуры двойников превращения область НВС включает относительно коротковолновые (s-) и относительно длинноволновые (ℓ-) смещения. В результате, порождаемый волновой процесс инициирует формирование основных компонент ДС, тогда как двойниковые компоненты формируются вследствие когерентного сопряжения с основными.

При решении задачи о наследовании упругого поля ДЦЗ волновым процессом (в реальных анизотропных средах) существенную роль играет учет квазипродольности ℓ-волн, реализуемый с помощью решения уравнения Кристоффеля..



### Основные результаты, выносимые на защиту

1. Учет реального соотношения скоростей  $s$ - и  $\ell$ -волн объясняет существование фрагментированной ДС в реальных тонкопластинчатых кристаллах мартенсита в сплавах Fe-Ni-C;
2. Число  $N_{\text{bas}}$  – количество основных компонент в ДС фрагмента существенно зависит от области локализации спонтанно активированной  $s$ - $\ell$  ячейки внутри фронта УВП;
3. УВП может наследовать тензор деформации упругого поля ДЦЗ, что подтверждено с помощью предложенного алгоритма наследования для случаев идентифицированных ранее ДЦЗ на примере титана и сплава Fe-31Ni;
4. ДЦЗ для мартенита охлаждения, наблюдаемого после предшествующей пластической деформации, с нетипичными ориентировками габитусных плоскостей вблизи  $(233)_{\gamma}$ - $(3\ 10\ 10)_{\gamma}$ , представляют собой относительно узкие прямоугольные петли с основными сегментами линий  $[01-1]_{\gamma}$  и векторами Бюргера  $\mathbf{b} \parallel \langle -311 \rangle_{\gamma}$ ;
5. Превращение с ГП  $\{233\}_{\gamma}$  и ОС Нишиямы естественно интерпретировать как следствие исходной быстрой деформации плоскостей  $\{011\}_{\gamma}$ , а в качестве критерия отбора использовать комбинированный фактор, равный произведению величин сдвига и относительного изменения объема.

### Научная и практическая ценность работы

Полученные результаты существенны для развития динамической теории не только реконструктивных, но и дисторсионных мартенситных превращений, расширяя возможности интерпретации наблюдаемых макроскопических морфологических признаков, включая и варианты обратимого протекания мартенситной реакции в сплавах с эффектом памяти формы. Можно ожидать, что развитые методики будут

способствовать не только анализу наблюдаемых особенностей протекания превращений, включая реальные неоднородные структуры двойников превращения, но и инициированию программ новых экспериментальных исследований.

### **Достоверность результатов работы**

Достоверность результатов исследования базируется на тщательном анализе литературных источников, использовании хорошо апробированной методики расчета упругих полей дефектов, ясности основных физических идей, логической последовательности работы и хорошем соответствии между полученными результатами и экспериментальными данными.

### **Личный вклад автора**

При написании литературного обзора, детализации постановки задачи, выполнении расчетов упругих полей дефектов и их обсуждении автором внесен существенный вклад. В том числе значительный вклад автора связан с разработкой и программной реализацией алгоритма наследования управляющим волновым процессом тензора деформации упругого поля ДЦЗ.

### **Апробация работы**

Материалы данной диссертации были продемонстрированы на Международной конференции «Актуальные проблемы физического металловедения металлов и сплавов» XXI Уральская школа металловедов – термистов (Магнитогорск 2012), Международной конференции «Актуальные проблемы прочности» (11–15 ноября Екатеринбург 2013), Международной конференции «Микромеханизмы пластичности, разрушения и сопутствующих явлений» (Тамбов 2013), Международной конференции «Актуальные проблемы физического металловедения сталей и сплавов» XXII Уральской школе материаловедов – термистов (Орск 2014), Международной конференции «Сплавы с эффектом памяти формы:

свойства, технологии, перспективы» (26 – 30 мая 2014 г. Витебск. Беларусь), VIII Международной конференции «Фазовые превращения и прочность кристаллов» (27-31 октября 2014, Черноголовка), Международной конференции «Актуальные проблемы физического металловедения сталей и сплавов» XXIII Уральская школа металловедов-термистов, посвященная 100-летию со дня рождения профессора А.А.Попова (2 – 6 февраля Тольятти 2016 г.), VIII Международной конференции «Микромеханизмы пластичности, разрушения и сопутствующих явлений» (27 июня – 1 июля Тамбов 2016 года).

### **Публикации**

Результаты работы представлены в 14 публикациях, включая 8 статей в журналах из рекомендованного списка ВАК РФ.

### **Структура диссертации**

Диссертация состоит из введения, 4 глав, заключения, списка литературы. Она изложена на 111 страницах машинописного текста, включая 15 рисунков, 2 таблицы, два приложения и список литературы, содержащий 139 наименований.

В первой главе приводится сжатая информация о характерных чертах мартенситных превращений. Кратко перечисляются ключевые позиции динамической теории для описания этих превращений. Подробно освещается динамическая теория формирования регулярной структуры двойников превращения. Заключение содержит список задач, поставленных в диссертации.

Во второй главе анализируется формирование реальной ДС при учете отклонения соотношения скоростей коротковолновых длинноволновых смещений от значения, необходимого для формирования регулярной структуры двойников

В третьей главе приводится алгоритм идентификации УВП, наследующего тензор деформации упругого поля ДЦЗ и проводится анализ такого наследования для случаев МП в титане и железо-никелевом сплаве.

В четвертой главе обсуждаются задачи, связанные с идентификацией ДЦЗ для мартенситного и бейнитного кристаллов с нетипичными ориентациями габитусных плоскостей, а также излагаются уточнения правил отбора ДЦЗ, использовавшихся на первом этапе развития динамической теории МП.

В Заключении содержатся основные результаты и отмечаются направления перспективных исследований.

## Глава 1. Информация, важная для постановки задач исследования

### 1.1 Характерные особенности морфологии и кинетики спонтанных мартенситных превращений

Охарактеризуем кратко случаи реконструктивного и дисторсионного МП на примере  $\gamma$ - $\alpha$  МП в сплавах на основе железа и МП в сплавах с эффектом памяти формы (на основе никелида титана).

Известно [1], что решетка исходной  $\gamma$ -фазы (аустенита) имеет ГЦК структуру, а решетка  $\alpha$ -фазы (мартенсита), возникающей при охлаждении, – ОЦК либо тетрагональную (ОЦТ) структуру.

$\gamma$ - $\alpha$  МП относится к типу реконструктивных переходов, при которых симметрии фаз не связаны соотношением соподчинения [2]. Такое кооперативное превращение обладает яркими признаками перехода 1-го рода. Кооперативность превращения проявляется в совокупности морфологических признаков, связанных между собой (см. напр., [1], [3]-[11]). Наиболее удобными (в силу простоты) для анализа являются ориентации габитусных плоскостей (ГП) кристаллов мартенсита. Поэтому, следуя [12], ГП выбирается в качестве базового признака, имеющего наглядное описание в схеме быстрого волнового роста мартенситного кристалла (МК). Обычно наблюдается небольшое число характерных ориентаций ГП, например:  $\{557\}_\gamma$ ,  $\{225\}_\gamma$ ,  $\{259\}_\gamma$  и  $\{3\ 10\ 15\}_\gamma$ . Для кристаллических решеток имеются также характерные межфазные ориентационные соотношения (ОС). Изменение формы превратившейся области описывают макросдвигом. Для ряда кристаллов типична тонкая внутренняя структура двойников превращения. Совокупность же кристаллов мартенсита образует, как правило, определенные ансамбли.

Важнейшей кинетической особенностью является высокая (сверхзвуковая) скорость роста отдельного МК, о чем свидетельствуют

экспериментальные данные [13-20] и анализ работ [13-19], выполненный в [12].

Следует подчеркнуть, что из-за больших значений деформаций решетки при реконструктивных МП, решетки исходной и конечной фаз не сопрягаются когерентно, в результате, превращения при нагреве не являются обратимыми по отношению к прямым (при охлаждении). Температурный гистерезис между прямым и обратным превращениями достигает сотен градусов, относительное изменение объема составляет несколько процентов, тепловой эффект (в случае автокаталитической макрокинетики) приводит к разогреву образца на десятки градусов.

Напротив, для дисторсионных переходов (группа симметрии решетки мартенсита является подгруппой симметрии решетки аустенита) МП может протекать с гораздо менее ярко выраженными признаками перехода I рода (см, например, [21- 24]) и высокой степенью обратимости превращения, связанной с когерентностью сочленений кристаллов, объясняющей феномен и термоупругого роста (наряду с вариантами быстрого роста), и практически значимого эффекта памяти формы.

Для дальнейшего существенно, что набор однозначно связанных макроскопических морфологических признаков (ГП, ОС, макросдвиг) имеет место и для дисторсионных МП. Поэтому можно ожидать, что в динамическом отношении имеются сходные механизмы быстрого управляемого волновым процессом роста МК, как для реконструктивных, так и для дисторсионных МП. Причем, случаю медленного роста могут быть сопоставлены различные сценарии (быстрый кратковременный скачкообразный рост с длительными паузами между скачками, колебательно-поступательный рост, либо медленный непрерывный рост нанокристаллических прослоек, обусловленный наложением волн с большими волновыми векторами и малыми групповыми скоростями). С точки зрения описания ориентаций ГП, эти сценарии могут давать

эквивалентные результаты. В пользу этого утверждения свидетельствуют расчеты морфологических признаков, выполненные в русле динамической теории МП, как для реконструктивных превращений [25-43], так и для сплавов с эффектом памяти формы [44-53].

## 1.2 Основные положения динамической теории гетерогенного зарождения и волнового роста мартенситного кристалла

Расчеты упругих полей ДЦЗ показывают, что всегда существуют области в форме вытянутых прямоугольных параллелепипедов, с ребрами, коллинеарными собственным векторам  $\xi_1, \xi_2, \xi_3$ , тензора деформаций поля, такие, что вдоль оси  $\xi_3$  деформация мала (либо равна нулю), а вдоль других имеет разные знаки.

Известно, что для деформации с главными значениями  $\varepsilon_1 > 0, \varepsilon_2 < 0, \varepsilon_3 = 0$  имеются инвариантные плоскости с нормальными  $N_{1,2}$ :

$$N_{1,2} \parallel \xi_2 \pm k \xi_1, |\xi_{1,2}| = 1, \quad (1.1)$$

Где

$$k = \frac{1 - |\varepsilon_2|}{1 + \varepsilon_1} \sqrt{\frac{\varepsilon_1 (2 + \varepsilon_1)}{|\varepsilon_2| (2 - |\varepsilon_2|)}}. \quad (1.2)$$

При деформации в области упругости  $\varepsilon_1, |\varepsilon_2| \ll 1$ , в (1.1), (1.2)  $k \approx \sqrt{\frac{\varepsilon_1}{|\varepsilon_2|}}$ . Если  $\varepsilon_3 \neq 0$ , но  $|\varepsilon_3| \ll \varepsilon_1, |\varepsilon_2|$ , то формула (1.1) определяет нормали  $N_{1,2}$  слабоискаженных плоскостей.

Таким образом, имеются объемные упруго деформированные области, способные при подходящей начальной флуктуации с энергией порядка  $k_B T$  ( $k_B$ -постоянная Больцмана,  $T$ -абсолютная температура) и температурах  $M_s$  ниже температуры равновесия фаз  $T_0$  скачком инициировать начальное возбужденное состояние с колебаниями, обеспечивающими деформацию типа растяжение-сжатие вдоль ортогональных направлений  $\xi_1$  и  $\xi_2$ . Такие колебания возбуждают

квазипродольные волновые пучки, распространяющиеся от области локализации НВС, имеющие волновые нормали вблизи  $\xi_1$  и  $\xi_2$ . Суперпозиция таких пучков в ходе распространения нарушает устойчивость метастабильного аустенита в пластинчатой области, являющейся прообразом мартенситного кристалла (см. рис.1.1). Ясно, что габитусная плоскость «заметается» линией пересечения фронтов волн, движущейся со скоростью, равной векторной сумме скоростей волновых пучков  $\vec{V} = \vec{V}_1 + \vec{V}_2$ , а деформируемая в каждый момент времени волнами область имеет вид вытянутого прямоугольного параллелепипеда (с поперечными размерами порядка половин длин волн  $\lambda_{1,2}/2$ ).

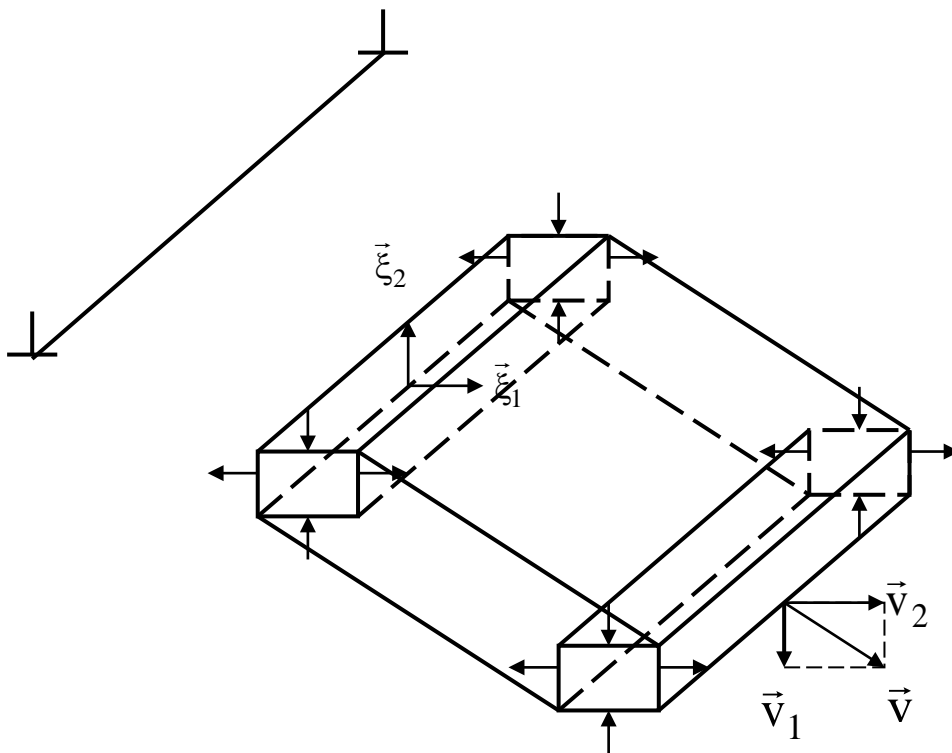


Рис. 1.1. Волновая модель управления ростом мартенситного кристалла

При волновом описании нормаль  $N_w$  к плоскости габитуса задается выражением:

$$N_w \parallel \left[ (\vec{V}_1 + \vec{V}_2) \times [\vec{V}_1 \times \vec{V}_2] \right] \quad (1.3)$$



Легко преобразовать (1.3) к виду:

$$\mathbf{N}_w \parallel (\mathbf{n}_2 - \mathfrak{a} \cdot \mathbf{n}_1), \quad (1.4)$$

$$\text{где } \mathbf{n}_1 = \frac{\vec{V}_1}{V_1}, \quad \mathbf{n}_2 = \frac{\vec{V}_2}{V_2}, \quad \mathfrak{a} = \frac{V_2}{V_1}.$$

Требование

$$N_w = N. \quad (1.1)$$

отражает объединение представлений о гетерогенном зарождении и волновом росте МК в рамках новой парадигмы.

Подставляя (1.1) и (1.4) в (1.5) при условии  $n_1 = \xi_1$ ,  $n_2 = \xi_2$  находим:

$$\frac{V_2}{V_1} = \mathfrak{a} \approx \sqrt{\frac{\varepsilon_1}{|\varepsilon_2|}}, \quad (1.2)$$

что позволяет согласовать волновое и деформационное описания габитуса.

Этот подход (в приближении чисто продольных волн) позволяет быстро проводить первичную идентификацию наиболее вероятных ДЦЗ как для прямого, так и обратного МП практически в любых сплавах, если известны значения упругих модулей, что было убедительно продемонстрировано в работах [25-53].

### **1.3 Динамическая модель формирования регулярной структуры двойников превращения**

Для МП в достаточной мере распространенным феноменом является формирование тонкой структуры двойников превращения. К примеру, при  $\gamma - \alpha$  МП в сплавах железа двойникование оказывается типичным для кристаллов с ГП типа  $\{3\ 9\ 11\}_\gamma \div \{3\ 10\ 15\}_\gamma$ . В таком случае мы можем наблюдать (см., к примеру, [1, 26]) появление двойниковой структуры (ДС), которая включает чередующиеся между собой слои основной и

двойниковой компонент, обладающих ортогональными (в своей начальной фазе) ориентировками главных осей сжатия  $\langle 001 \rangle_\gamma$  деформации Бейна. Следует напомнить, что деформация Бейна (см. рис. 1.2) это сжатие до значения, близкого к 20% по направлению оси  $\langle 001 \rangle_\gamma$ , с синхронными растяжениями вдоль двух других осей  $\langle 100 \rangle_\gamma$  и  $\langle 010 \rangle_\gamma$  (или же вдоль осей  $\langle 110 \rangle_\gamma$  и  $\langle 1\bar{1}0 \rangle_\gamma$  со значением растяжения около 13%).

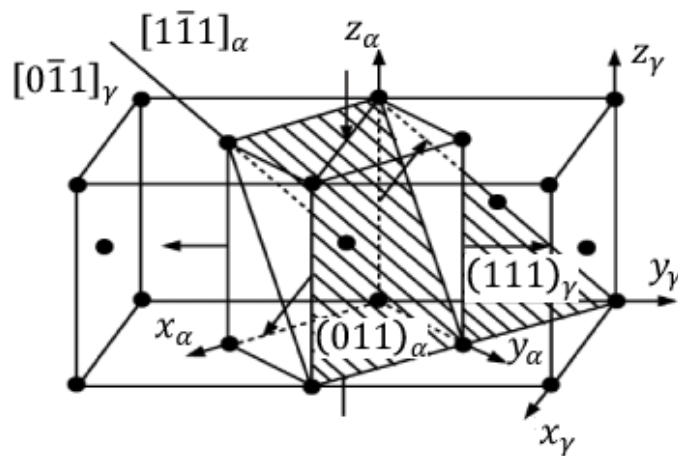


Рис. 1.2. Соответствие плоскостей и направлений при деформации Бейна [1]

В таком случае, показанная на рис. 1.2 изначальная форма ОЦТ-ячейки, тетрагональность которой задается величиной  $t = \sqrt{2}$  будет переходить или в ОЦК – ( $t=1$ ), или же станет ОЦТ-ячейкой для значений  $t$  близких к единице.

Каждая из двух компонент ДС обладает общей осью растяжения, направление которой ортогонально осям сжатия и принадлежит совокупности  $\langle 001 \rangle_\gamma$ . При этом отношение  $\beta$  для объемных долей двойниковых компонент удовлетворяет неравенствам  $1 < \beta < 2$ , распределение компонент не будет являться строго регулярным, а сочленение по плоскостям  $\{110\}_\gamma$ , которые переходят в плоскости  $\{112\}_\alpha$ , может считаться близким к когерентному.

При кристаллогеометрическом анализе (см., к примеру, [54-57]) существование двойников превращения принято рассматривать как один из вариантов неоднородной деформации с инвариантной решеткой, которая вместе с однородной деформацией приводит к суммарной деформации с макроскопически инвариантной [54] или же слабоискаженной [55-57] плоскостью, задающей ориентацию ГП. При этом требование о сведении результирующей деформации к деформации с инвариантной (или слабоискаженной) плоскостью будет выполнено только при строго фиксированном отношении объемных долей двойниковых составляющих.

При применении термодинамического подхода (см., к примеру, [9, 58-60]) основное внимание связывается с вопросами, относящимися к расчету термодинамической движущей силы, то есть к разности значений химических свободных энергий для начальной и конечной фазы. Уместно отметить, что наличие данной разности является необходимым условием для реализации полиморфизма. Сущность же мартенситной реакции заключается в физической природе кооперативного механизма перестройки. Понятно, что получение ответа на этот главный вопрос выходит за рамки возможностей равновесной термодинамики. Согласно интерпретации морфологических признаков в рамках термодинамики, контакт начальной (аустенит) и конечной (мартенсит) фаз по инвариантной плоскости рассматривается как необходимое условие для минимизации возможной упругой энергии сосуществующих фаз. Полисинтетическое двойникование при этом рассматривается в качестве механизма, обеспечивающего эффективную релаксацию упругих напряжений, предпочтительного в области низких температур в сравнении с процессом дислокационного скольжения в аустените. При высоких температурах можно допустить неинвариантность ГП, связанную с облегчением релаксации напряжений по причине сдвигов в окружающем аустените.

При динамическом подходе, который претендует на право быть инструментом для того, чтобы описывать процессы формирования кристаллов мартенсита, и, в общем случае, интерпретировать стадии зарождения, роста новой фазы и аккомодационные явления, следует отметить направления:

1. трактовки, которые базируются на использовании функционала Гинзбурга-Ландау [61] и обобщениях этого функционала применительно к различным (по размерностям пространства и видам структурных перестроек) моделям (см., например, [62-71]);
2. метод молекулярной динамики (см., например, [72-74]);
3. метод согласованного распространения коротковолновых ( $s$ -волны) и длинноволновых ( $\ell$ - волны) решеточных смещений, позволяющий сочетать сверхзвуковую скорость роста основной компоненты двойника и сверхзвуковую скорость кристалла мартенсита (см., например, [75-86])

Следуя [86], допустим, что имеется единственная коротковолновая  $s$ -ячейка со стартовыми значениями равных по модулю деформаций растяжения и сжатия вдоль ортогональных осей симметрии четвертого порядка. Причем результирующая деформация (с наложением более длинноволновых  $\ell$  - смещений) обеспечивает преодоление межфазного барьера. Полагая, что растущая в  $[1\bar{1}0]_\gamma$  направлении со скоростью  $v_{tw} = v_{1,2s} \sqrt{2}$  тонкопластинчатая компонента будет способна к непрерывному излучению суперпозиционных волновых пучков в  $[110]_\gamma$  - направлении, нетрудно вывести условие получения активной коротковолновой ячейки, которая будет находиться в оптимальной для выполнения граничных условий области, локализованной внутри фронта УВП. Конкретно, середина коротковолновой ячейки будет совмещаться с точкой в центре фронта УВП, если соотношение фаз для коротковолновых и длинноволновых колебаний будет соответствовать максимальным значениям требуемых деформаций

растяжения и сжатия. Для выполнения этого условия нам достаточно потребовать равенства времени, которое затрачивается на прохождение со скоростью  $v_{2\ell}$  длинноволновой компонентой УВП (несущей деформацию сжатия) отрезка, имеющего проекцию на плоскость  $(001)_\gamma$ , совпадающую с гипотенузой прямоугольного треугольника (см. рис. 1.3), с временем, которое займет прохождение двух катетов этого треугольника суперпозицией коротковолновых пучков при скорости  $v_{tw} = v_{1,2S} \sqrt{2}$ . На рис. 1.3  $\psi$  – это угол между проекцией вектора скорости  $v_{2\ell}$  компоненты УВП, которая несет деформацию сжатия, на плоскость  $(001)_\gamma$  и направлением  $[100]_\gamma$ . В этом случае условием для воспроизведения оптимальных условий, при которых произойдет активизация коротковолновой ячейки в зоне волнового фронта УВП, будет:

$$v_{1s} = v'_{2\ell}(\psi) \cos(\psi), \quad (1.7)$$

где обозначение  $v'_{2\ell}(\psi)$  соответствует проекции скорости  $\vec{v}_{2\ell}$  на плоскость  $(001)_\gamma$ . В длинноволновом пределе значения  $v_{2\ell}$  для известных упругих модулей материала будет находиться из уравнения Кристоффеля [87]. В общем случае при любом выбранном значении длины волны  $\lambda_{2\ell}$  нахождение  $\vec{v}_{2\ell}$  потребует от нас применения закона дисперсии фононов, хотя для реализации МП в монокристаллах либо же в крупных зернах при учете длинноволновой природы  $\ell$ -волн применение уравнения Кристоффеля будет допустимо. Тем не менее, если мы перейдем к мелкому зерну, использование закона дисперсии в целях уточнения  $\vec{v}_{2\ell}$  при прецизионном количественном описании может стать необходимым. Любопытно, что из равенства (1.7) определенному значению скорости  $v_\ell$  будет сопоставлено единственное значение скорости  $v_s$ . При этом, с использованием закона дисперсии  $\varepsilon_s(\vec{k}_s)$  (который имеет монотонный характер вдоль волновых векторов  $\vec{k}_s \parallel \langle 001 \rangle_\gamma$ ) для величины  $v_s$  однозначно будет сопоставляться значение  $k_s$  и  $\lambda_s = 2\pi/k_s$ .

Исходя из этого, при условии отсутствия смягчения мод у выделенных квазиимпульсов (жесткие моды) отбор  $\lambda_\ell$  будет связан с соотношением масштабов пространства, который соответствует процессу зарождения в упругом поле дислокации. Одновариантный отбор  $\lambda_s$  является обусловленным требованием согласования действия s- и  $\ell$ -волн, которое отражается соотношением (1.7).

Покажем для наглядности на рис. 1.3 (а) распределение основных (серые области) и дополнительных (белые области) компонент образующейся структуры при  $d_s = \lambda_s/4$  и  $\psi = 26,6^\circ$ . На рис. 1.3 (б) показан увеличенный фрагмент рис. 1.3 (а), который демонстрирует описанное ранее условие воспроизведения активной коротковолновой ячейки. Отличительный признак структуры – строгая периодичность при распределении компонент. В рассмотренном ранее примере соотношение объемов компонент задается величиной  $\beta = 2$ .

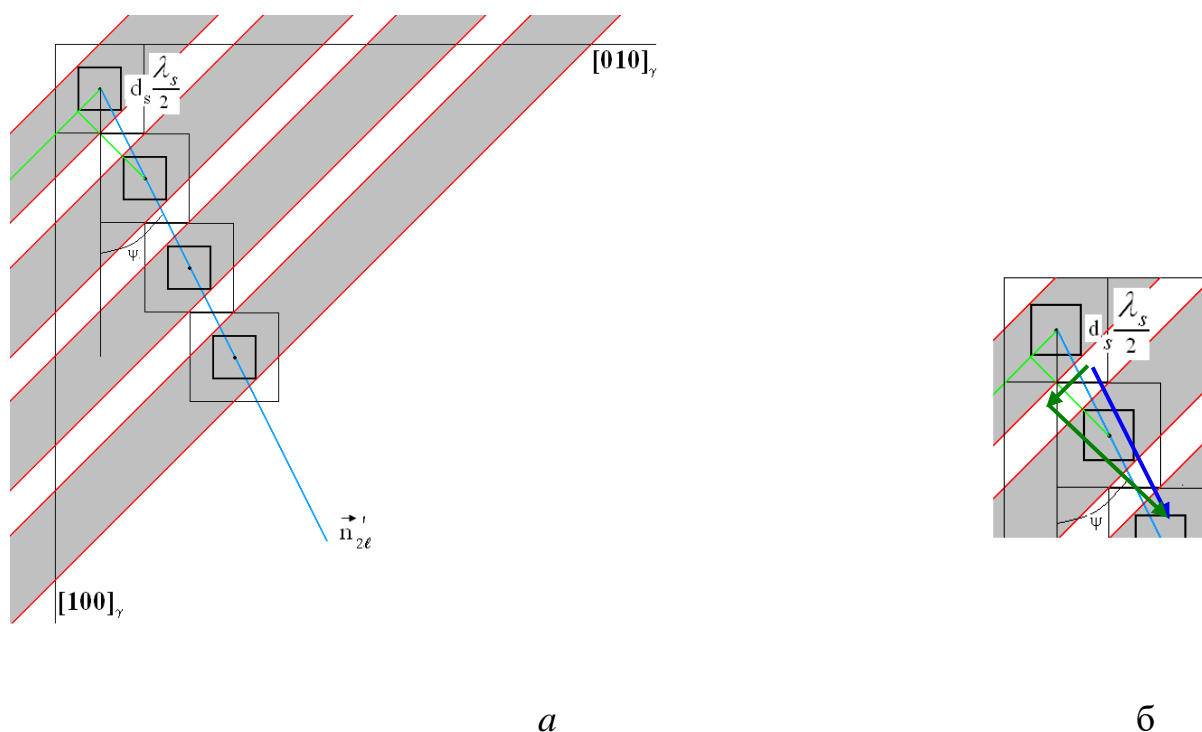


Рис. 1.3. Динамическая модель формирования регулярной слоистой структуры, включая и ДС [86]

В общем случае появляющаяся строго периодическая слоистая структура будет характеризоваться соотношением объемов компонент, которое определяется исключительно параметром  $d_s/\lambda_s$  и направлением распространения волны, отвечающей на мезомасштабе в составе УВП за деформацию сжатия:

$$\beta = \frac{4 \frac{d_s}{\lambda_s}}{1 + \operatorname{tg}\psi - 4 \frac{d_s}{\lambda_s}}. \quad (1.8)$$

Если направление  $\vec{n}'_{2\ell}$ , соответствует габитусу  $(10\ 3\ 15)_\gamma$ , при  $\operatorname{tg}\psi=0.3$  и  $\beta=2$  из (1.8) можем найти  $d_s \approx 0.87 \frac{\lambda_s}{4}$ . В этом случае модуль исходной деформации на границе ячейки  $|\varepsilon_{2s}(d_s/2)| \approx 0.7755 |\varepsilon_{2s}|_{\max}$ . Найденный результат дает рассмотреть процесс формирования слоистых структур (и, в частности, ДС) как исключительно динамический.

Стоит отметить, что периодически восстанавливаемая активная s-ячейка в центральной области фронта  $\ell$  - пучка обеспечивает запуск роста каждой новой тонкопластинчатой компоненты по направлению от центра к краям мартенситного кристалла и отражает ход согласованного действия бегущих s- и  $\ell$ -пучков.

Если разделить сумму длин катетов треугольника, который показан на рис. 1.3, на скорость  $v_{tw}=v_{1,2s}\sqrt{2}$ , можно убедиться, что промежуток времени  $\Delta t_1$  между парой ближайших стартов роста полос будет равен  $T_s/2$ , где  $T_s=\lambda_s/v_s$  период s-колебаний.

Стоит упомянуть, что в процессе распространения вдоль катета по направлению  $[1\bar{1}0]_\gamma$  роста основной компоненты двойника процесс затухания, будет, как минимум, компенсироваться. Однако, при распространении вдоль катета по направлению  $[110]_\gamma$ , ортогонального

направлению роста, излучаемые волновые s-пучки не будут поддерживаться неравновесной электронной подсистемой, и следует учитывать их затухание. Время  $\Delta t_2$  процесса распространения вдоль катета в направлении  $[110]_\gamma$ :

$$\Delta t_2 = T_s \frac{\tilde{d}_s(1+\beta)}{2\beta} \leq \Delta t_1, \quad (1.9)$$

где равенство будет возможно лишь в случае  $\text{tg}\psi=1$  при  $\psi = \pi/4$ . Малые значения интервала времени  $\Delta t_2$  позволяют в первом приближении не учитывать затухание s-пучков между двумя последовательными актами воспроизводства возбужденной коротковолновой ячейки. Поэтому в данной работе мы сосредоточим основное внимание на другом факторе, а именно на выполнении условия (1.7).

#### 1.4 Задачи исследования

Проведенное краткое описание базисных положений динамической теории мартенситных превращений позволяет сформулировать следующие задачи исследования.

1. -Рассмотреть основные особенности наблюдаемых распределений двойников превращения и проанализировать влияние отклонений в соотношении скоростей волн от идеального варианта в формуле (1.7) на формирование структуры двойников превращения.
2. -Установить условия наследования управляющим волновым процессом тензора деформации упругого поля ДЦЗ, разработать алгоритм поиска необходимого УВП и показать возможность реализации этих условий в конкретных случаях (на примерах  $\alpha$ - $\epsilon$  МП в титане и  $\gamma$ - $\alpha$  МП в сплаве Fe-31Ni).
3. -Идентифицировать, в рамках развитой в динамической теории методологии, ДЦЗ для нетипичной ориентации габитусов  $(332)_\gamma$



мартенсита охлаждения при  $\gamma$ - $\alpha$  МП в сплаве Fe-31Ni после предварительной интенсивной пластической деформации.

4. -Кроме перечисленных задач, связанных с существенным развитием возможностей динамической теории МП для интерпретации особенностей конкретных вариантов реализации мартенситной реакции, будет рассмотрено и уточнение правил отбора ДЦЗ по сравнению с формулировавшимися на раннем этапе развития динамической теории, когда еще не был описан переход от пороговых к конечным деформациям, превышающим пороговые значения на 2-3 порядка. Уместно отметить, что впервые этот вопрос был поставлен и решен для модели ОЦК-ГПУ мартенситного превращения. Переход к финальным деформациям позволил проводить не только сравнение расчетных ориентировок габитусных плоскостей с наблюдаемыми ориентациями, но и сравнение ориентационных соотношений и макросдвига.

В структуре диссертации решению первой задачи посвящается глава 2. В главе 3 основное внимание уделяется решению второй задачи. Рассмотрению вопросов, указанных в пунктах 3 и 4, посвящена глава 4.

## **Глава 2. Модуляция соотношения компонент двойников превращения, обусловленная реальным соотношением скоростей волн в составе управляющего волнового процесса**

### **2.1 Вводные замечания**

Рассмотренная в п.1.3 идеальная схема формирования регулярной двойниковой структуры допускает возможность только однократного спонтанного возникновения возбужденной коротковолновой  $s$ -ячейки с многократным последующим воспроизведением в структуре УВП и только при условии строгого согласования скоростей  $s$ - и  $\ell$ -волн. Таким образом, предполагается и согласованность фаз  $s$ - и  $\ell$ -колебаний, которые обеспечивают оптимальные условия для преодоления межфазного барьера. Ясно, что спонтанность формирования начальной  $s$ -ячейки предопределяет разделение факторов, которые существенны для образования реальных ДС, на факторы детерминированные и стохастические. К числу первых следует отнести, в первую очередь, отклонение соотношения скоростей  $s$ - и  $\ell$ -волн от идеального, задаваемого (1.7), так как оно задается упругими модулями исследуемого металла или сплава и симметрией решетки, задающей закон дисперсии для упругих волн (учет дисперсии существен, в основном для  $s$ -волн). К ним можно отнести и затухание  $s$ -волн, поскольку, когда мы знаем структуру системы (ее химический состав, наличие и распределение в ней примесей и структурных дефектов), а также температуру ее превращения, величину затухания можно связать с определенными процессами рассеяния. Ко второй группе факторов, несомненно относятся разности фаз  $s$ - и  $\ell$ -колебаний в момент возникновения  $s$ -ячейки, а кроме того, ее поперечный размер и амплитуда колебаний, которые задают уровень коротковолновых деформаций. Очевидно, что построение полной динамической картины формирования реальной ДС – задача с несколькими значащими факторами. В нашем исследовании, мы, главным образом, сосредоточим

внимание на одном детерминированном факторе, принимая, что остальные факторы соответствуют идеальной постановке задачи (отсутствует затухание волн, фазы колебаний обеспечивают максимальный вклад в пороговую деформацию в начальный момент времени, а длины волн  $\lambda_s$  постоянны). Тогда, выбирая систему (сплав) с известными нам значениями упругих модулей и законами дисперсии для нужных фононных ветвей спектра, мы можем установить, насколько реальный случай отличается от идеального соотношения (1.7), и к чему приводит такое отличие.

Также отметим, что, говоря, для краткости, о  $s$ -ячейке, мы в действительности подразумеваем вытянутый прямоугольный параллелепипед с ребрами, коллинеарными трем осям симметрии четвертого порядка  $\langle 001 \rangle_\gamma$ . При этом два ребра равны и имеют размеры  $< \lambda_s/2$ , во много меньшие длины третьего ребра  $\sim \lambda_\ell/2$ , таким образом можно считать, что речь идет о  $s$ - $\ell$  ячейке.

## 2.2 Примеры реальных структур двойников превращения

Кристаллы  $\alpha$  –мартенсита в форме тонких пластин при мартенситном превращении (МП) в сплавах на основе железа характеризуются габитусами близкими  $\{31015\}_\gamma - \{2\ 5\ 9\}_\gamma$  [1]. В большинстве случаев такие кристаллы имеют тонкую двойниковую структуру (ДС) с чередующимися ортогональными направлениями главных осей сжатия. Но, как показали эксперименты по иницированию МП сильным магнитным полем [88], могут образовываться, в том числе тонкопластинчатые, кристаллы, которые не обладают двойниками превращения. В кристаллогеометрическом подходе [54-57] наличие регулярной ДС (или же регулярной системы сдвигов) оказывается необходимым условием для образования кристаллов с габитусами  $\{31015\}_\gamma - \{2\ 5\ 9\}_\gamma$ . Для того, чтобы обеспечить макроскопическую инвариантность габитусов при МП, каждому габитусу должно соответствовать единственное определенное соотношение  $\beta$

компонент ДС. Тем не менее, как видно из рис. 2.1-2.3, при наличии ДС существует только тенденция к регулярности (в смысле чередования компонент), в то время как величина  $\beta$  может варьироваться в пределах одного кристалла мартенсита (в [90] впервые указано на наличие вариаций и приведены их интервалы). В это же время можно заметить и некоторые элементы подобия. Так, на рис. 2.3 проиллюстрирована часть рисунка ДС из [89] для сплава Fe-30Ni-0.39C, на которой нами нанесены цифры, показывающие ряд похожих серий кристалликов основной компоненты (белые полосы) с разным количеством кристалликов в серии, при этом первый из кристалликов серии имеет максимальную ширину.

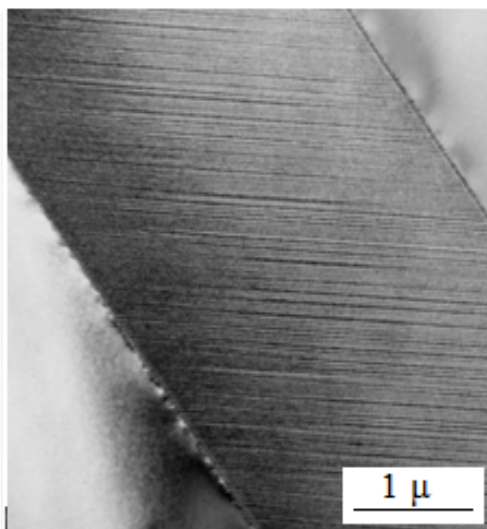


Рис. 2.1 Двойники превращения в сплаве Fe-30Ni-0.39C: продвойникованный тонкопластинчатый кристалл [89]

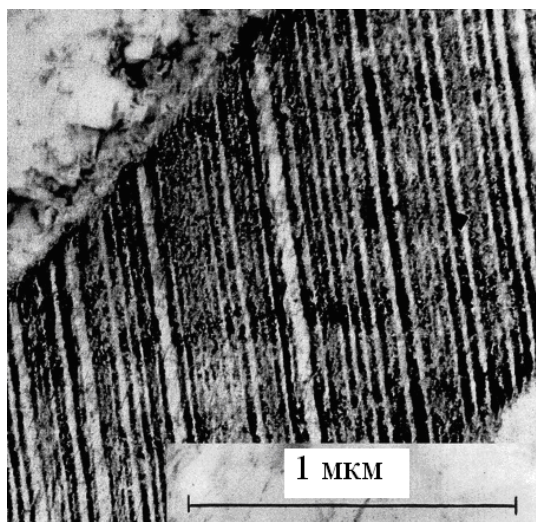


Рис. 2.2 Стандартная структура [88] кристаллов мартенсита в стали 52X2H23: продвойникованный тонкопластинчатый кристалл

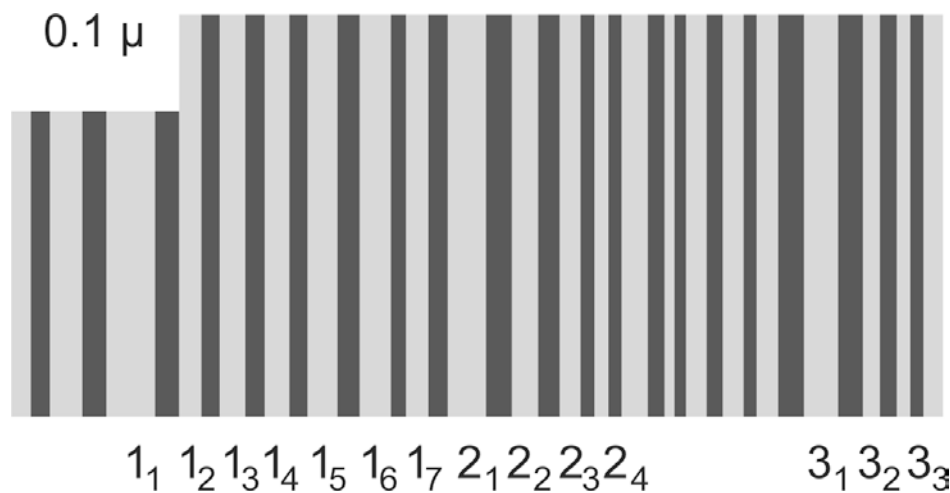


Рис. 2.3. Двойники превращения для сплава Fe-30Ni-0.39C [89], нумерация предположительно трех серий кристалликов основной компоненты ДС нанесена нами, также нами увеличена контрастность рисунка

Само собой, такие данные не совместимы с выводами [54], а тем более с упомянутым выше [88] фактом отсутствия ДС.

Общие принципы динамической теории МП в случае  $\gamma$ - $\alpha$  МП в сплавах на основе железа были описаны в главе 1, включая вопрос формирования регулярной структуры двойников превращения в сверхзвуковом режиме. Стоит подчеркнуть, что, в отличие от кристаллогеометрического подхода, в рамках динамической теории оснований для упомянутой выше коллизии между расчетными и экспериментальными данными не обнаруживается, так как за формирование габитусной плоскости отвечают исключительно  $\ell$  - волны. Основная роль описания ДС (вместе со сверхзвуковой скоростью роста кристаллов) для понимания природы МП упоминалась в [90], там же были перечислены причины, приводящие к варьированию отношения объемов компонент ДС.

### 2.3 Аппроксимация закона дисперсии s-волн и оценка разности скоростей волн на примере сплава Fe-30%Ni

Условие (1) образования регулярной ДС требует от нас знания законов дисперсии фононов  $\varepsilon_k$  вдоль  $\langle 001 \rangle_\gamma$ -направлений, применимых для любых волновых векторов  $\mathbf{k}$ , поскольку необходимо сопоставление скоростей  $\ell$ - и s-волн для  $\mathbf{k}_\ell$  и  $\mathbf{k}_s$ , при значениях  $k_s \gg k_\ell$ .

Были рассмотрены монотонно нарастающие зависимости энергий фононов  $\varepsilon_k$  вдоль направлений  $\Gamma$  для волновых чисел, которые меняются от нуля до наибольшего значения  $2\pi/a$  (где  $a$  – параметр решетки) в центральных точках X квадратных граней первой зоны Бриллюэна, применительно к случаю ГЦК решетки аустенита. В роли аппроксимирующих функций мы сравнивали синусоиду и аппроксимацию параболического вида с вершиной в точке X и ветвями, которые направлены вниз. Для безразмерных переменных  $y = \varepsilon_k / (\varepsilon_k)_{\max}$  и  $x = k / k_{\max}$  приведенные функции имеют следующий вид:

$$y_1 = \sin(x\pi/2), \quad 1 - y_2 = (1-x)^p \text{ при } p > 1. \quad (2.1)$$

Подбор показателя степени  $p$  (допустимы и дробные значения) в (2.1) был осуществлен на основе сравнения с экспериментальными данными. А именно: в длинноволновом пределе необходимо совпадение значений скоростей волн со значениями скоростей звуковых волн. Следует напомнить, что в этом пределе для указанных нами направлений фазовые и групповые скорости совпадают. Из (2.1) для безразмерных скоростей  $v = dy/dx$  следует:

$$v_1 = dy_1/dx = (\pi/2)\cos(x\pi/2), \quad v_2 = dy_2/dx = p(1-x)^{p-1}. \quad (2.2)$$

Из (2.2) при  $x \rightarrow 0$  следует  $v_1(0) = \pi/2$ ,  $v_2(0) = p$ . Так как для синусоидальной аппроксимации значение  $v_1(0) = \pi/2$  не изменяется, предпочтение при выборе аппроксимации было отдано второму варианту. Для размерных единиц имеем  $v_2(0) = p (\varepsilon_k)_{\max} / \hbar k_{\max}$ , где  $\hbar$  – постоянная Планка. В коротковолновом пределе было проверено совпадение

максимальных значений энергии  $\varepsilon_k$  для соответствующих фононов. Например, для Ni, используя данные для упругих модулей и условия (2.1) и (2.2), легко получить значение  $p \approx 1.733$ , которое хорошо согласуется и с результатами [91] для коротковолновой области спектра. Используя данные о фононной дисперсии сплава Fe-30Ni [92], нетрудно видеть, что кривые дисперсии сплава схожи с кривыми дисперсии для Ni и могут быть получены умножением на коэффициент 0.953 значений  $\varepsilon_k$  для Ni. Исходя из этого, выполненный анализ допустим и для указанного сплава, кристаллы мартенсита которого обладают тонкой двойниковой структурой.

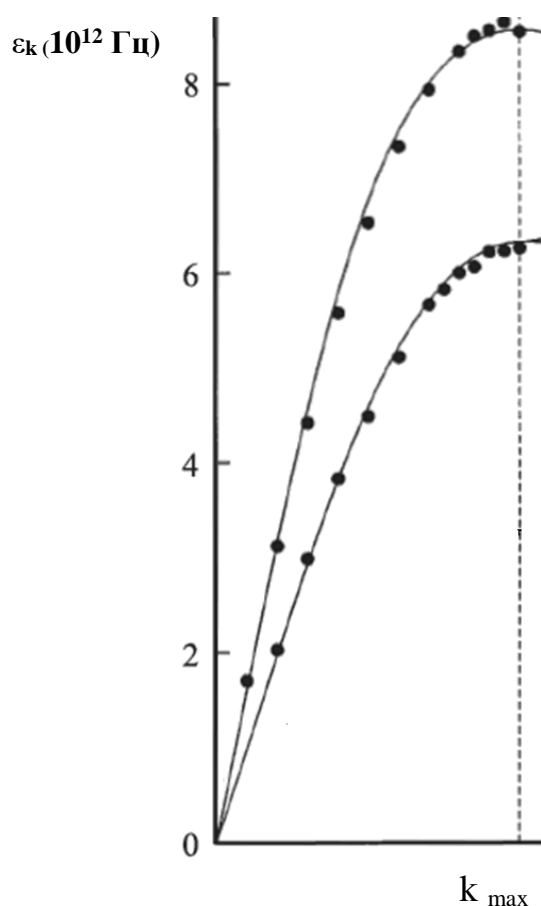


Рис. 2.4. Закон дисперсии фононов вдоль  $[001]_\gamma$  для Ni [91], аппроксимируется кривая с большей энергией

Таким образом, закон дисперсии  $\varepsilon_k$  вдоль  $\langle 001 \rangle_\gamma$  для  $0 \leq k \leq k_{\max} = 2\pi/a$  ( $a$  – параметр решетки) аппроксимируется в безразмерных переменных  $u$  и  $x$  функцией

$$1-y=(1-x)^p, y=\varepsilon_k/(\varepsilon_k)_{\max}, x=k/k_{\max}. \quad (2.3)$$

Например, для сплава Fe30Ni с ГЦК решеткой хорошее соответствие с экспериментальными данными достигается при  $p \approx 1.733$ . Кроме коротковолновой области, значения групповых  $v_g(x)=dy/dx$  и фазовых скоростей  $v_\phi(x)=y/x$  для s-волн сильно не отличаются ( $v_\phi(x) \geq v_g(x)$ ). Таким образом, допуская, что величины  $k_s$  хотя бы на порядок меньше  $k_{\max}$ , мы сохраним обозначение  $v_s$  без подобной детализации, уделяя внимание различию скоростей  $v_s$  и  $v'_\ell$  в (1.7).

Для кристаллов с габитусами близкими  $\{31015\}_\gamma - \{259\}_\gamma$  угол  $\psi$  меняется от  $\approx 16.7^\circ$  до  $\approx 21.8^\circ$  и  $0.9578 \geq \cos\psi \geq 0.9285$ . При значениях упругих модулей [93] для сплавов Fe-Ni, даже без учета дисперсии вдоль  $\langle 001 \rangle_\gamma$ , значения  $v_s/v'_\ell$  не относятся к интервалу значений  $\cos\psi$ , но, тем не менее, близки к нему. Таким образом, для габитуса  $\{31015\}_\gamma$   $v_\ell/v_s \approx 1.17$ , а  $v'_\ell/v_s \approx 1.155$ , то есть  $v_s/v'_\ell \approx 0.8655$ . Данные оценки показывают, что в случае выбранного нами конкретного сплава Fe-30Ni, являющегося достаточно типичным примером, имеет место неравенство

$$v_s < v'_\ell \cos\psi, \quad (2.4)$$

а в качестве реальной величины разности между скоростями, которая ведет к модуляции ДС, можно принять  $\Delta v = v'_\ell \cos\psi - v_s \approx 0.11v_s$ .

#### 2.4 Пороговые условия деформации и качественная картина формирования модулированной ДС

Знание величины  $\Delta v$  дает понимание наблюдаемых (см. рис. 2.2, 2.3) в областях двойникования зон с убывающими либо нарастающими толщинами компонент ДС.

Стоит напомнить, в динамической теории [81] полагается, что локальная потеря устойчивости решетки исходной фазы образуется в ячейках, в объеме которых выполняется пороговое условие для деформации сжатия  $\varepsilon_2$



$$|\varepsilon_2| = |\varepsilon_{[100]}| = |\varepsilon_{2\ell}(d_s/2)| + |\varepsilon_{2s}(d_s/2)| \geq |\varepsilon_{2th}|. \quad (2.5)$$

В (2.5) главная ось сжатия тензора бейновской деформации коллинеарна  $[100]_\gamma$ ,  $\varepsilon_{2\ell,s}(d_s/2)$ - вклады в деформацию от  $\ell$ - и  $s$ -волн по границе  $s$ -ячейки с поперечным размером  $d_s < \lambda_s/2$ , а  $\varepsilon_{2th}$  – ее пороговое значение. Разумеется, для запуска трехмерной деформации существенна и деформация растяжения в  $\ell$ -волне, движущейся в направлении практически ортогональном плоскости рис.2, но для задач работы достаточно исследовать деформацию сжатия.

Поскольку образование тонкопластинчатых кристаллов (как и кристаллов пакетного мартенсита) может происходить и без участия двойников превращения [88, 90], понятно, что  $\ell$ -волны (ответственные за описание габитусов) могут нарушать устойчивость решетки в области локализации начального возбужденного состояния (НВС), поперечный размер которой  $d_\ell < \lambda_\ell/2$  вне зависимости от наличия  $s$ -волн. Учитывая это, приходим к выводу, что вклад  $|\varepsilon_{2\ell}(d_\ell/2)|_{th}$  значим, и быстрый прирост основной компоненты ДС происходит в решетке, лишаящейся устойчивости по отношению к  $\ell$ -волнам. Следовательно, вполне закономерно, что рост компонент двойника заканчивается на граничных (габитусных) поверхностях кристалла мартенсита (это хорошо заметно на рис. 2.2).

Учитывая, что пороговые деформации возле температуры  $M_s$  малы, при анализе допускается использование гармонического приближения для аналитического представления волновых деформаций. Тогда при локализации начала координат в центре квадратной  $s$ -ячейки деформация у границы ячейки на момент времени  $t$  имеет следующий вид:

$$|\varepsilon_{2s}(t, d_s/2)| = |\varepsilon_{2s}|_{\max} \cos(\omega_s t - k_s d_s/2), \quad \omega_s = v_s k_s, \quad k_s d_s/2 = \pi d_s/\lambda_s. \quad (2.6)$$

Начальная фаза в (2.6) выбрана таким образом, чтобы при  $t=0$  максимальной деформации  $|\varepsilon_{2s}|_{\max}$  отвечал центр ячейки (как показано на рис. 1.). Подобно (2.6) задается и деформация сжатия в  $\ell$ -волне

$$|\varepsilon_{2\ell}(t, d_s/2)| = |\varepsilon_{2\ell}|_{\max} \cos(\omega_\ell t - k_\ell d_s/2), \quad \omega_\ell = v_\ell k_\ell, \quad k_\ell d_s/2 = \pi d_s/\lambda_\ell. \quad (2.7)$$

Из (2.6) ясно, что снижение размера  $d_s$  происходит с увеличением  $|\varepsilon_{2s}(d_s/2)|$ , следовательно, выполнение требования (2.5) на определенном интервале отклонений от критериев формирования регулярной ДС, становится возможным за счет снижения величины  $d_s$ .

## 2.5 Оценка числа кристалликов основной компоненты ДС, порождаемых единственной спонтанно активированной ячейкой

Положим, что в момент времени  $t=0$  в области локализации НВС центры  $s$ - и  $\ell$ -ячеек налагаются, затухание волн отсутствует (как это и допускается при выводе (1.7)), но выполняется неравенство (2.4). Тогда ясно, что рождение последующей  $s$ -ячейки на фронте отстает по отношению к изменению положения центра  $\ell$ -ячейки. Оценим, на какое значение при этом понизится уровень  $|\varepsilon_{2\ell}(d_s/2)|$ . При различии скоростей  $\Delta v$  через время  $T_s/2$  в области активизации самой близкой новой  $s$ -ячейки накопится разность хода  $\Delta v T_s/2$  между максимальными значениями деформаций  $s$ - и  $\ell$ -волн. После чего уровни деформаций  $|\varepsilon_{2\ell}(\pm d_s/2)|$  изменятся и будут различаться.

Рассматривая для примера  $\Delta v \approx 0.11v_s$ , определяем  $\Delta v T_s/2 \approx 0.11\lambda_s/2$ . Привлекая данные из Табл. 2 в [81], для рассматриваемого случая используем значения  $\operatorname{tg}\psi = 1/3$ ,  $d_s/\lambda_s = 1/5$  при соотношении компонент регулярной ДС  $\beta = 3/2$ . Тогда разность хода  $0.11\lambda_s/2$  будет составлять около 27% от  $d_s$ . Очевидно, уровень  $|\varepsilon_{2\ell}(t, +d_s/2)|$  на одной из границ ячейки (здесь и далее координаты отсчитываются от центра новой возбуждаемой ячейки) станет вначале возрастать (при последовательной активации новых четырех ячеек), а потом уменьшаться. При этом уровень  $|\varepsilon_{2\ell}(t, -d_s/2)|$  на другой границе ячейки только монотонно убывает. Но при выполнении неравенства  $\lambda_s \ll \lambda_\ell$ , вариации  $|\varepsilon_{2\ell}(t, d_s/2)|$  будут относительно небольшими. Остановившись, для определенности, на значениях  $|\varepsilon_{2\ell}(t, -d_s/2)|$ , подтвердим сказанное, учтя, что  $|\varepsilon_{2\ell}(t, -d_s/2)|$

уменьшится от  $|\varepsilon_{2\ell}(0, -d_{s0}/2)| = |\varepsilon_{2\ell}|_{\max} \cos(k_{\ell} d_{s0}/2)$  в нулевой момент времени до значения

$$|\varepsilon_{2\ell}(nT_s/2, -d_{s0}/2)| = |\varepsilon_{2\ell}|_{\max} \cos[k_{\ell}(n\Delta\nu T_s/2 + d_{s0}/2)] \quad (2.8)$$

в момент времени  $t_n = nT_s/2$ . В (2.8)  $n$  задает номер  $s$ -ячейки в ряду ячеек, активация которых будет индуцироваться в дискретные моменты времени  $t_n = nT_s/2$  суперпозициями  $s$ -волн уже после спонтанной активации нулевой ячейки, но переменная ширины ячеек не учитывается. Так, при  $\lambda_{\ell} = 50\lambda_s$  и  $\Delta\nu T_s/2 \approx 0.11\lambda_s/2$  и исходном размере  $d_{s0}/\lambda_s = 0.2$  из (2.8) для нормированных деформаций  $\Delta_n$

$$\Delta_n = |\varepsilon_{2\ell}(nT_s/2, -d_{s0}/2)| / |\varepsilon_{2\ell}|_{\max} \quad (2.9)$$

найдем:

$$\Delta_n = \cos[\pi(n \cdot 0.11 + 0.2)\lambda_s / \lambda_{\ell}] = \cos[\pi(n \cdot 0.11 + 0.2)/50]. \quad (2.10)$$

В таблице 2.1, с целью сравнения, даны оценки, найденные с помощью (2.10), и разности показателей нормированных деформаций  $\Delta_n - \Delta_0$  на расстояниях  $d_{s0}/2$  от центра ячеек (таких же, что и в нулевой ячейке).

Таблица 2.1. Зависимость нормированных деформаций от номера  $s$ -ячейки

$n$	0	1	10	30	40	50
$\Delta_n$	0.99992	0.99981	0.99667	0.97592	0.95852	0.93655
$\Delta_0 - \Delta_n$	0	$\approx 1.1 \cdot 10^{-4}$	$\approx 3.25 \cdot 10^{-3}$	$\approx 2.4 \cdot 10^{-2}$	$\approx 4.14 \cdot 10^{-2}$	$\approx 6.34 \cdot 10^{-2}$

Значит, при выбранных условиях и значениях параметров, рост  $n$  происходит с монотонным уменьшением  $\Delta_n$ , компенсация которого будет сопровождаться уменьшением толщины кристалликов (слоев) основной компоненты ДС и, естественно, к монотонному увеличению толщины двойниковой компоненты. Так как, исходя из определения, величина  $\beta \geq 1$ , мы можем оценить номер  $s$ -ячейки, при котором будет достигнут нижний предел  $\beta = 1$ . По «реперным» данным из Табл. 2 в [81], при таком же  $\text{tg}\psi = 1/3$ , значению  $\beta = 1$  соответствует  $d_s/\lambda_s = 1/6$ . Тогда, полагая, что

вклады в пороговую деформацию s- и  $\ell$ -волн близки, мы можем принять, что снижение значений отношения  $d_s/\lambda_s$  от 1/5 до 1/6, сопровождающееся повышением уровня нормированных деформаций от начального значения  $\Delta_s \approx 0.81$  до конечного  $\Delta_f = \sqrt{3}/2 \approx 0.866$ , как раз и возмещает убыль вклада  $|\varepsilon_{2\ell}(t, -d_s/2)|$ . Из показанных в таблице 2.1 оценок понятно, что такая компенсация будет иметь место для ячеек с номером  $40 < n < 50$ .

Стоит заметить, что данное в Табл. 2.1 в роли последнего значение  $n=50$  соответствует при заданном соотношении  $\lambda_\ell=50\lambda_s$  наибольшему значению  $n_{\max}$ , поскольку активироваться могут только s-ячейки, расположенные от центральной не далее, чем на  $d_\ell/2$ .

Введем символ  $N_{\text{bas}}$  для количества кристалликов (слоев) основной компоненты ДС, инициированных одной спонтанно активировавшейся s-ячейкой. Из проделанного анализа делаем вывод, что максимальный размер  $(N_{\text{bas}})_{\max}$  оказывается достижимым, если порождающая s-ячейка является локализованной вблизи одной из границ  $d_\ell/2$  (обозначим ее  $+d_\ell/2$ ), при условии, что активация следующих s-ячеек сначала сопровождается монотонным ростом  $|\varepsilon_{2\ell}(t, -d_s/2)|$  и, следовательно, монотонным ростом  $d_s$ . Далее, после достижения наибольших значений  $|\varepsilon_{2\ell}(t, -d_s/2)|_{\max}$  и  $(d_s)_{\max}$ , происходит монотонное снижение  $d_s$  по указанному выше сценарию. Минимальной величине  $N_{\text{bas}}=1$  отвечает локализация спонтанной s-ячейки возле второй границы  $-d_\ell/2$ . Этот вариант может быть представлен в виде одиночных базисных компонент, кардинально отличающихся по ширине от примыкающих к ним. Понятно, что возможность спонтанной активации s-ячейки в полосе с шириной  $d_\ell/2$  значительно превосходит вероятность активации s-ячеек, центры которых локализуются только в центральной области полосы между границами  $\pm d_\ell/2$ . В связи с этим можно ожидать, что в общем числе двойников превращения доминировать должны фрагменты ДС с числами  $N_{\text{bas}}$ , которые удовлетворяют неравенствам  $2n_{\max} > N_{\text{bas}} > n_{\max}$ . Ясно, что  $(N_{\text{bas}})$

$n_{\max} = 2n_{\max}$  и при  $n_{\max}=50$  имеем  $(N_{\text{bas}})_{\max} = 100$ . Однако и появление фрагментов ДС при  $n_{\max} > N_{\text{bas}} > 1$  вполне ожидаемо.

Подчеркнем, что не столько учет дополнительных факторов, препятствующих формированию регулярной структуры ДС, но и рост отношения  $\lambda_s / \lambda_\ell$ , как и увеличение  $\Delta v$ , ведут к уменьшению количества чисел  $N_{\text{bas}}$ , сопоставляемых различным фрагментам ДС.

## 2.6 Заключение к главе 2

Учет действительного соотношения скоростей s- и  $\ell$ - волн, на примере сплава Fe-30Ni, ведет к отклонению от идеального условия для формирования регулярной ДС. Вследствие этого формируется модулированная структура ДС, которая состоит из фрагментов. Их размеры зависят от места локализации в области фронта УВП спонтанно образующейся s- ячейки, порождающей рассматриваемый фрагмент. Следовательно, в отличие от формирования регулярной ДС, случаю достаточно протяженных двойникованных тонкопластинчатых кристаллов будут соответствовать многократные спонтанные возбуждения s-ячеек.

Знание величины  $v'_\ell / v_s$ , вместе с учетом затухания волн, открывают возможность интерпретации наблюдаемых (см. рис. 2.2, 2.3) в областях двойникования зон, в которых убывают либо нарастают толщины компонент ДС. Подобная «модуляция» распределения ДС отслеживает, на наш взгляд, акты преодоления межфазных барьеров, соответствующие выполнению порогового условия для потери устойчивости решетки аустенита в ходе распространения управляющего волнового процесса (УВП), включающего в себя  $\ell$ - и s –волны. На самом деле, максимальной по толщине основной компоненте ДС отвечает близкое к идеальному синфазное наложение  $\ell$ - и s- деформаций, которое в процессе распространения УВП без выполнения (1.7) расстраивается. Исходя из этого, возбуждение последующей коротковолновой ячейки будет

требовать сужения пространственного масштаба, на границах которого будет достигнут такой же уровень пороговой деформации.

Понятно, что при формальном рассмотрении, позволяющем изменить фактор упругой анизотропии, условие вида (1.7) выполнимо, так как для чисто изотропной среды скорости волн одинаковой поляризации (продольной либо поперечной) будут равны между собой, а учет дисперсии скоростей  $v_s$  в (1.7) даст равенство левой и правой части при определенном волновом векторе  $k_s$ . Данные о температурной зависимости упругих модулей [23, 24] указывают на тенденцию к изотропизации упругих свойств, при приближении к температуре  $M_s$ , для ряда сплавов на основе никелида титана.

Полезно обсудить кратко и другой случай формирования ДС, относящийся к B2-B19' МП в сплавах на основе TiNi. Очевидно, что в качестве s-волн необходимо выбрать волны с нормальми вдоль пары ортогональных осей  $[110]_{B2}$  и  $[1-10]_{B2}$ . Именно эти волны обеспечивают основной вклад в деформацию. В отличие от  $\gamma$ - $\alpha$  МП, при B2-B19' МП наибольшая из главных деформаций бейновского типа связана с растяжением. Следовательно, одна из  $\ell$ -волн, наоборот случаю  $\gamma$ - $\alpha$  МП, станет способствовать совместному для обеих компонент ДС сжатию вдоль  $[001]_{B2}$ , а другая  $\ell$ -волна, несущая фазу растяжения (именно скорость этой волны следует подставлять в (1.7) в качестве  $v_\ell$ ), нарушает вырождение по ориентировкам осей растяжения, явно выделяя основную компоненту ДС. Волновая нормаль этой  $\ell$ -волны образует с плоскостью  $(001)_{B2}$  небольшой угол, поэтому для анизотропного кристалла в длинноволновом пределе будет выполняться неравенство  $v_{[110]} > v'_\ell$ . Но в таком случае при переходе к более коротким s-волнам (при учете дисперсии) непременно найдется волновой вектор  $k_s$ , для которого условие (1.7) будет выполняться для групповой скорости  $v_s$  и без изотропизации упругих свойств. В случае, если уровень затухания этих s-волн оказывается порядка сотой доли от полной энергии s-колебания, то

для обсуждаемого нами варианта двойникования (с плоскостями двойникования  $\{001\}_{B2}$  или  $\{110\}_{B19'}$ ) уместно ожидать более регулярной структуры ДС, чем при  $\gamma$ - $\alpha$  МП.

Учет других факторов, нарушающих условия реализации регулярной ДС, может только уменьшать длину фрагментов ДС (по сравнению с приведенными значениями).

Вместе с различием скоростей  $s$ - и  $\ell$ - волн, учет затухания волн (в первую очередь  $s$ - волн), является еще одним вполне детерминированным фактором, оценка вклада которого в модуляцию ДС оказывается весьма актуальной и заслуживает отдельного рассмотрения.

Выполненный анализ указывает путь реконструкции локальной динамики волнового формирования ДС по наблюдаемым фрагментам модулированной структуры ДС, выходящий за рамки простого усредненного описания.

Результаты, полученные в главе 2, опубликованы в [94]-[98].

### Глава 3. Наследование тензора деформации упругого поля дислокационного центра зарождения управляющим волновым процессом

#### 3.1 Вводные замечания

Текущий этап развития динамической теории реконструктивных мартенситных превращений [99-103] дает возможность проводить прецизионные расчеты прогнозируемых морфологических признаков, а также в значительной мере решать обратную задачу - восстановление динамики превращения, опираясь на информацию о наблюдаемых особенностях морфологии. Исходя из этого, для удобства чтения главы 3, стоит еще раз напомнить наиболее важные положения динамической теории на предшествующем данному исследованию этапе ее развития.

Стартовая стадия МП связана с возникновением начального возбужденного состояния (НВС) в упругом поле дислокационного центра зарождения (ДЦЗ). Область локализации НВС обладает формой прямоугольного параллелепипеда, с ребрами, направленными вдоль ортогональных собственных векторов  $\xi_i$  ( $i=1, 2, 3$ ) тензора деформации  $\hat{\varepsilon}$  упругого поля ДЦЗ, при этом для собственных значений  $\varepsilon_i$  будут выполняться условия  $\varepsilon_1 > 0$  (растяжение),  $\varepsilon_2 < 0$  (сжатие) и  $\varepsilon_3 \approx 0$ . Это значит, что тензор  $\hat{\varepsilon}$  дает описание плоской деформации со слабоискаженными плоскостями, имеющими нормали

$$N_{1,2} \parallel \xi_2 \pm \xi_1 k, \quad k = [(1+\varepsilon_2)/(1+\varepsilon_1)][(2+\varepsilon_1)\varepsilon_1 / |\varepsilon_2| (2+\varepsilon_2)]^{1/2}, \quad |\xi_{1,2}| = 1. \quad (3.1)$$

После того, как устойчивость решетки в объеме параллелепипеда была скачкообразно потеряна, естественно считается, что выделенная, преимущественно в виде колебаний ионов, энергия в значительной мере расходуется на возбуждение управляющего волнового процесса (УВП), который несет пороговую деформацию, нарушающую устойчивость исходной фазы.



В базовой модели управления ростом кристалла УВП сопоставляется суперпозиция двух волновых пучков квазипродольных волн с ортогональными волновыми нормалью  $\mathbf{n}_1$  и  $\mathbf{n}_2$ . В зоне наложения пучков происходит плоская деформация растяжения ( $\varepsilon_{1w} > 0$ ) и сжатия ( $\varepsilon_{2w} < 0$ ), то есть УВП неизбежно наследует тип деформации в области локализации НВС. Нормали  $N_w$  к плоскости габитуса, которые связаны с распространением УВП, описываются равенством:

$$N_{w1,2} \parallel \mathbf{n}_2 \pm \mathbf{n}_1 \varkappa, \quad \varkappa = v_2/v_1, \quad |\mathbf{n}_{1,2}| = 1, \quad (3.2)$$

где  $v_1$  и  $v_2$  – абсолютные значения скоростей распространения волн в  $\mathbf{n}_1$  и  $\mathbf{n}_2$  направлениях.

Кроме того считается, что кинематическому описанию ориентации габитуса (3.2) отвечает динамическое описание, которое аналогично по сути (3.1), и в таком случае имеет место коллинеарность нормалей:

$$N_{w1,2} \parallel N_{d1,2}, \quad (3.3)$$

где  $N_{d1,2}$  соответствует (3.1) при заменах  $\xi_i \rightarrow \xi_{wi}$ ,  $\varepsilon_i \rightarrow \varepsilon_{wi}$ ,  $k \rightarrow k_w$ , где  $\xi_{wi}$  и  $\varepsilon_{wi}$  собственные векторы и собственные значения тензора деформации  $\hat{\varepsilon}_w$ , сопоставляемого УВП. Так как УВП связывается с распространением относительно малых пороговых деформаций, имеет место соотношение:

$$k_w \approx [\varepsilon_{1w} / |\varepsilon_{2w}|]^{1/2} \quad (3.4)$$

При качественных оценках можно ограничиться приближением продольных волн, приводящим к равенствам  $\xi_{1,2} = \xi_{w1,2} = \mathbf{n}_{1,2}$  и  $\varkappa = k = k_w$ . Но для более детального описания нужен явный учет квазипродольности волновых пучков, который осуществлен впервые в [80, 81], что сразу дало возможность существенно повысить соответствие теоретического описания наблюдаемых экспериментально морфологических признаков. Определение тензора деформации, который сопоставлен в [80, 81] суперпозиции пары квазипродольных волн, коротко дано в п. 3.2.

Основной акцент, согласно [104], делается на введении тензора деформации  $\hat{\varepsilon}_w$ , который сопоставляется УВП, в случае, когда  $n_{1,2}$  и  $\xi_{w1,2}$  относятся к плоскости симметрии  $\{110\}_c$  (здесь и далее точные ориентации указываются в базисе  $\langle 001 \rangle_c$  кубической решетки). Причем  $\xi_3 \parallel n_3$ , а между параметрами  $\varkappa$ ,  $k_w$ ,  $\psi$  задана связь:

$$k_w = (\varkappa + \operatorname{tg} \psi) / (1 - \varkappa \operatorname{tg} \psi). \quad (3.5)$$

Соотношение (3.5) явным образом обобщает элементарный вариант  $k_w = \varkappa$ . Принимая, во-первых, значимость этого обобщения, а во-вторых, его относительную несложность, вывод (3.5), следуя [104], приводится в п. 3.2. Дальнейший вывод о связи между  $k_w$  и  $\varkappa$  (то есть оригинальная часть главы 3), необходимый для реализации наследования тензора деформации упругого поля ДЦЗ управляющим волновым процессом, рассматривается в п. 3.3, а примеры наследования приводятся в п.3.4, 3.5.

### **3.2 Тензор деформации, сопоставляемый волновому процессу, управляющему ростом мартенситного кристалла при волновых нормалях, лежащих в плоскости симметрии $(110)_c$**

Приближение продольных волн, которое ведет к соотношению  $k_w = \varkappa$  при небольших пороговых деформациях  $\varepsilon_{th}$ , полностью оправданно, в случае когда волновые нормали  $n_1$  и  $n_2$  совпадают с осями симметрии (акустическими осями). В случае кубических кристаллов, ими могут быть пары осей  $\langle 100 \rangle_c$  и  $\langle 010 \rangle_c$ ,  $\langle 110 \rangle_c$  и  $\langle 001 \rangle_c$ ,  $\langle 1\bar{1}0 \rangle_c$  и  $\langle 111 \rangle_c$ .

Стоит заметить, что первая пара волн находится в плоскости симметрии вида  $\{001\}_c$ , где играет главную роль в описании тонкой структуры двойников превращения при  $\gamma$ - $\alpha$  МП. Из-за эквивалентности направлений нормалей для этой пары пучков значение  $\varkappa = 1$  ( $\varkappa = 1$  и для каждой пары волн с ортогональными нормалями в этой плоскости симметрии).

Вторая пара волн находится в плоскости симметрии  $\{1\bar{1}0\}_c$ , и, как показано в [39, 40], является базовой для описания инициирования максимальной скорости деформации плоскостей  $\{1\bar{1}0\}_c$  при  $(\alpha-\varepsilon)$  МП. Более того, данная пара волн ведет к ориентациям габитусов вида  $\{hhl\}_c$ , которые наблюдаются и при  $(\gamma-\alpha)$ , и при  $(\alpha-\varepsilon)$  МП. Для этих двух волн параметр  $\varkappa \neq 1$  и варьируется при отклонении нормалей (которые остаются в плоскости симметрии) от осей симметрии, при этом волны становятся квазипродольными.

Понятно, что третья пара волн способна инициировать деформацию плоскости  $\{11\bar{2}\}_c$  с максимальной скоростью.

В общем случае тензор  $\hat{\varepsilon}_w$  плоской деформации, который можно сопоставить УВП, имеет ориентации собственных векторов  $\xi_{iw}$ , которые не совпадают с волновыми нормальными. Исходя из [80, 81], результирующий тензор, который сопоставляется паре волн с волновыми нормальными  $n_{1,2\ell}$  будет иметь вид:

$$\hat{\varepsilon}_{r\ell} = \tilde{\varepsilon}_{w1} + \rho \tilde{\varepsilon}_{w2}, \quad (3.6)$$

где  $\tilde{\varepsilon}_{w1} = 0.5(\mathbf{u}_1^0 \cdot \mathbf{n}_{1\ell} + \mathbf{n}_{1\ell} \cdot \mathbf{u}_1^0)$ ,  $\tilde{\varepsilon}_{w2} = 0.5(\mathbf{u}_2^0 \cdot \mathbf{n}_{2\ell} + \mathbf{n}_{2\ell} \cdot \mathbf{u}_2^0)$ ,  $\rho = -u_{20}k_{2\ell}/u_{10}k_{1\ell}$ ,  $\mathbf{u}_i^0$  - единичные векторы поляризации,  $u_{i0}$  - амплитуды смещений, индекс  $\ell$  указывает на достаточно длинные волны, которые ответственны за формирование габитуса, а точка, расположенная между векторами соответствует диаде. Понятно, что величина  $\rho$  близка к отношению максимальных деформаций сжатия и растяжения, которые развиваются в отдельных волнах суперпозиционного волнового процесса. Поэтому в роли нулевого приближения для  $\rho$  можно использовать  $\rho \approx -\varkappa^{-2}$ .

В случае, когда нормали  $\mathbf{n}_1$  и  $\mathbf{n}_2$  лежат в плоскостях симметрии  $\{1\bar{1}0\}_c$  (если учитывать квазипродольный характер волн), легко установить вид тензора деформации, сопоставляемого УВП, и выполнить его анализ в аналитической форме (в отличие от произвольного варианта), что

немаловажно для прецизионного описания морфологических признаков в рамках динамической теории и последующих обобщений. На самом деле, в базисе, который образован волновыми нормальными  $\mathbf{n}_1$  и  $\mathbf{n}_2$  и их векторным произведением  $[\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2] = \mathbf{n}_3$ , можно диагонализировать тензор (3.6), если учесть, что проекции векторов поляризации квазипродольных волн на  $\mathbf{n}_3$  будут равны нулю. Собственные числа  $\tilde{\epsilon}_{1,2}$  тензора (3.6) представляются в виде:

$$\tilde{\epsilon}_{1,2} = 0.5\{(\mathbf{u}_1^0, \mathbf{n}_1) + \rho(\mathbf{u}_2^0, \mathbf{n}_2) \pm (1 - 2\rho |[\mathbf{u}_1^0, \mathbf{u}_2^0]| + \rho^2)^{0.5}\}. \quad (3.7)$$

В (3.7) символы  $(, )$  и  $[, ]$  означают скалярное и векторное произведения соответственно, в результате  $(\mathbf{u}_1^0, \mathbf{n}_1)$  совпадает с косинусом угла, а  $|[\mathbf{u}_1^0, \mathbf{u}_2^0]|$  – с синусом угла между перемножаемыми векторами. Таким образом, из (3.7) очевидно, что для чисто продольных волн  $\tilde{\epsilon}_1 = 1$ , а  $\tilde{\epsilon}_2 = \rho$ .

Собственные нормированные векторы  $\tilde{\xi}_{1,2}$  тензора (3.6) будут коллинеарны следующим векторам

$$\tilde{\xi}_{1,2} \parallel [0.5[(\mathbf{u}_1^0, \mathbf{n}_2) + \rho(\mathbf{u}_2^0, \mathbf{n}_1)]; \tilde{\epsilon}_{1,2} - (\mathbf{u}_1^0, \mathbf{n}_1); 0]_c. \quad (3.8)$$

Не трудно убедиться, что ориентации (3.8) будут изменяться очень слабо при варьировании значений параметра  $\rho$ . Это обуславливается суперпозиционным характером тензора, который сопоставляется волнам с ортогональными нормальными. На самом деле, для каждой из волн, ориентации пар собственных ортогональных векторов тензоров деформаций  $\tilde{\xi}_{w1}$  и  $\tilde{\xi}_{w2}$  оказываются близки между собой, совпадают также знаки вкладов деформаций, направленные вдоль соответственных осей, вследствие чего ориентации собственных векторов тензора  $\hat{\epsilon}_{r\ell}$  зависят, в первую очередь, от ориентаций нормалей. В то же время, собственные значения (3.7) существенно зависят от  $\rho$ .

Проводя замену в (3.1)  $\xi_{1,2}$  на  $\tilde{\xi}_{1,2}$ , допустим, что взаимно ортогональные векторы  $\tilde{\xi}_{1,2}$  оказываются повернутыми (вокруг оси  $n_3$ ) относительно волновых нормалей  $n_{1,2}$  на угол  $\psi$ . Далее, выражая  $\tilde{\xi}_{1,2}$  через  $n_{1,2}$ , из требования  $N_w \parallel N_d$  найдем:

$$k = (\varkappa + \operatorname{tg} \psi) / (1 - \varkappa \operatorname{tg} \psi). \quad (3.9)$$

Найденные результаты являются точными, для случая волновых нормалей  $n_{1,2}$ , лежащих в плоскости симметрии  $\{110\}_c$ , при котором векторы  $u_{1,2}^0$  и  $\tilde{\xi}_{1,2}$  тоже лежат в данной плоскости. Понятно, что для продольных волн (при  $\psi=0$ ) из (3.9) будет верно  $k = \varkappa$ . Отсюда делаем вывод, что если волновые нормали отклонены от осей симметрии (но остаются в плоскости симметрии) необходимо рассматривать не упрощенный вариант  $k = \varkappa$ , а модифицированный (3.9). В этом случае, в зависимости от знака угла поворота (направления поворота) возможны случаи  $k > \varkappa$  (при  $\psi > 0$ ), либо  $k < \varkappa$  (при  $\psi < 0$ ). При данных волновых нормалях  $n_{1,2}$ , а также рассчитанных (при помощи уравнения Кристоффеля) векторах поляризации  $u_{1,2}^0$  и параметре  $\varkappa$  величина  $\psi$  будет легко находится с учетом (3.8). Таким образом, корень из отношения деформаций (3.7) может быть согласован с (3.9) выбором конкретного значения  $\rho$ .

Оценим для иллюстрации значение  $\operatorname{tg} \psi$ , при котором величина  $k=1.05$ , а  $\varkappa=0.95$ . Подставляя в (3.9)  $k=1.05$  и  $\varkappa=0.95$ , находим  $\operatorname{tg} \psi \approx 0.05$  и  $\psi \approx 2.9^\circ$ . Поскольку при отклонениях от осей симметрии (особенно при выходе нормалей из плоскости симметрии  $(1-10)_c$ ) величина  $\varkappa$  может возрастать, то величина  $\psi$  может быть и меньше  $2.9^\circ$ . Разумеется, при выходе векторов  $u_{1,2}^0$  и  $\tilde{\xi}_{1,2}$  из плоскости волновых нормалей соотношение (3.9) становится приближенным, и для прецизионных расчетов необходимо проводить дополнительный анализ.

### 3.3 Связь между отношениями деформаций и скоростей управляющих волн в наиболее общем случае непараллельных векторов $\xi_i$ и $n_i$ и алгоритм проверки возможности наследования тензора деформации упругого поля ДЦЗ управляющим волновым процессом

Из соотношения (3.1) очевидно, что векторы  $N_{1,2}$ , являясь линейной комбинацией векторов  $\xi_{1,2}$ , ортогональны их векторному произведению  $[\xi_1, \xi_2] = \xi_3$ . Аналогично  $N_{d1,2}$  ортогональны  $\xi_{w3}$ . Согласно (3.2), имеем ортогональность  $N_{w1,2}$  с вектором  $n_3$ . Следовательно, имеем нулевые скалярные произведения векторов:

$$(N_{d1,2}, \xi_{w3})=0, (N_{w1,2}, n_3)=0. \quad (3.10)$$

Очевидно, что ориентации векторов, удовлетворяющие (3.3), коллинеарны линии пересечения плоскостей, имеющих нормали  $\xi_{w3}$  и  $n_3$ , то есть векторному произведению  $[\xi_{w3}, n_3]$ :

$$N_{w1,2} \parallel N_{d1,2} \parallel [\xi_{w3}, n_3]. \quad (3.11)$$

Если требовать наследования упругого поля ДЦЗ волновым процессом, то  $N_d = N$  и  $\xi_{wi} = \xi_i$  известны из расчетов упругого поля ДЦЗ. Тогда из (3.11) следует:

$$(\xi_3, N_w)=0, (n_3, N)=0. \quad (3.12)$$

При учете определений (3.1) и (3.2) из уравнений (3.12) находим:

$$a = |(\xi_3, n_2) / (\xi_3, n_1)|, \quad k = |(n_3, \xi_2) / (n_3, \xi_1)|. \quad (3.13)$$

Из (3.13) следует:

$$a = |(\xi_3, n_2) (n_3, \xi_1) / (\xi_3, n_1) (n_3, \xi_2)| k. \quad (3.14)$$

Напомним, ожидаемые ориентировки  $N$  при некотором значении радиальной координаты  $R$  связываются с экстремумами (по угловой координате  $\theta$  при значении  $\theta^*$ ) собственных значений тензора деформаций ДЦЗ. Для проверки возможности наследования выбранной

ориентировки  $N$  волновым процессом необходимо выполнить следующие операции.

1. Определение ориентации  $n_3$ . Выбирая  $N$  в качестве оси вращения и меняя угол поворота  $\varphi$ , добиваемся совпадения повернутого вектора  $\xi'_3 = \xi_3(\varphi)$  с ориентацией  $n_3$  для определенного угла  $\varphi^*$ , при котором, согласно (3.13),  $|(\xi'_3, \xi_2) / (\xi'_3, \xi_1)| = k$  и, следовательно,  $\xi_3(\varphi^*) = n_3$ . При этом ориентации  $\xi_1(\varphi^*)$  и  $\xi_2(\varphi^*)$  естественно принять за нулевое приближение для искомых волновых нормалей  $\xi_1(\varphi^*) = n_{10}$  и  $\xi_2(\varphi^*) = n_{20}$ . Эта операция наверняка реализуема.

2. Определение ориентаций  $n_1$  и  $n_2$ . Найденная ориентация  $n_3$  выбирается в качестве оси вращения и для каждого значения угла поворота  $\omega$  проверяется первое из соотношений (3.13), записываемое в виде

$$\alpha(\omega) = |(\xi_3, n_{20}(\omega)) / (\xi_3, n_{10}(\omega))|, \quad (3.15)$$

где зависимость  $\alpha(\omega)$  рассчитывается с помощью стандартного уравнения Кристоффеля. Если при некотором  $\omega^*$  (3.15) выполняется, то УВП, наследующий упругое поле ДЦЗ, существует. Если (3.15) при выбранном значении  $R$  не выполняется, то, изменив  $R$ , нужно провести новый итерационный цикл.

Интересная возможность заключается в том, что выполнение (3.15) достигается лишь при определенном значении  $R^*$ . Тогда  $\theta^*$  и  $R^*$  задают пространственные координаты области локализации НВС, порождающего волновой процесс, наследующий упругое поле ДЦЗ.

### 3.4 Наследование упругого поля ДЦЗ при В2-В19 МП в сплаве TiNiCu

Напомним, в [105] было показано, что описание габитусов с парой равных индексов, близких к  $(334)_c$ , при ОЦК-ГПУ МП в Ti может быть получено на примере ДЦЗ с линиями  $\Lambda \parallel \langle 1\bar{1}0 \rangle_c$  и векторами Бюргерса краевой ориентации  $\langle 001 \rangle_\alpha$ . Поскольку и при В2-В19 МП в сплаве TiNiCu

наблюдаются кристаллы с габитурами, близкими  $(334)_c$ , при выборе ДЦЗ естественно основываться на результатах анализа [105].

Возьмем ДЦЗ в виде прямоугольной петли с размерами (за единицу измерения принимается параметр решетки  $a$ )  $L_1 = 7 \cdot 10^3$  (по направлению основных сегментов  $A_1 \parallel [1\bar{1}0]_c$ ) и  $L_2 = 10^4$  (вдоль  $A_2 \parallel [110]_c$ ). Фиксация цилиндрической системы отсчета в пространстве по отношению к прямоугольной дислокационной петле, ориентации сторон которой задаются единичными векторами  $\tau_1$  и  $\tau_2$ , показана на рис. 3.1.

Ясно, что начало отсчета соответствует центру сегмента  $A_1$ , а отсчет полярного угла  $\theta$  осуществляется от плоскости петли. Причем значениям угла  $\theta > 0$  будет соответствовать поворот, производимый против часовой стрелки, если наблюдать за поворотом с конца вектора  $\tau_1$ . Расстояние до точки наблюдения  $R$  также задается в единицах параметра решетки  $a$ .

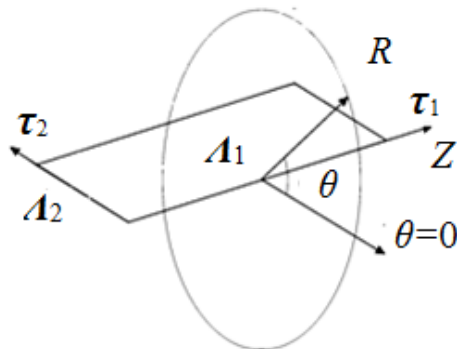


Рис.3.1. Цилиндрическая система координат, которая используется для расчетов упругих полей дислокационных петель

### 3.4.1. Данные расчета упругого поля ДЦЗ в форме прямоугольной петли с вектором Бюргерса $[100]_c$ смешанной ориентации относительно основного сегмента петли $[1\bar{1}0]_c$

Для никелида титана характерна высокая степень дальнего порядка, поэтому кратчайшие из векторов Бюргерса  $b$  в В2 фазе коллинеарны осям симметрии 4 порядка  $b \parallel \langle 001 \rangle_c$ . В отличие от [105] выберем не краевую  $b \parallel [001]_c$  (приводящую к малым отклонениям нормалей  $n_1$  и  $n_2$  от осей



симметрии в плоскости  $(1\bar{1}0)_c$ , а смешанную  $\mathbf{b} \parallel [100]_c$  ориентацию относительно основного сегмента  $[1\bar{1}0]_c$ .

На рис.3.2 представлены угловые зависимости характеристик упругого поля ДЦЗ при  $R=1500$ , рассчитанные для упругих модулей (на основе данных в [106,107]) сплава Ti-Ni-10Cu-2Fe (в единицах ТПа):

$$C'=0.013, C_L=0.186, C_{44}=0.034. \quad (3.16)$$

Цифрами указаны значения угловой переменной  $\theta$  (заданные в градусах). Собственные числа  $\varepsilon_3$  тензора деформации поля ДЦЗ являются малыми по сравнению с  $\varepsilon_1, |\varepsilon_2|$ , поэтому соответствующая им кривая  $\varepsilon_3(\theta)$  на графике не приводится. Так как в анализе важны только угловые локализации экстремумов  $\varepsilon_{1,2}$  (а также отвечающие им ориентации собственных векторов), абсолютные значения  $\varepsilon_{1,2}$  нами не приводятся, масштабирование изображения выбирается удобным для восприятия.

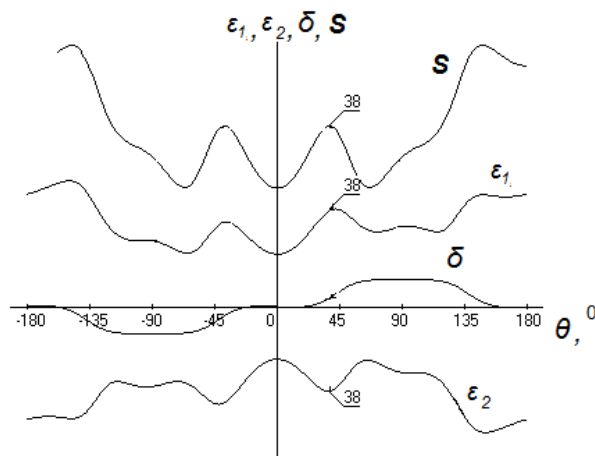


Рис. 3.2. Угловые зависимости модуля сдвига  $S$ , собственных чисел  $\varepsilon_{1,2}$  тензора деформаций и относительного изменения объема  $\delta$  упругого поля дислокационной петли при  $R = 1500$ .

Для наших целей не требуется анализ всех особенностей приведенных зависимостей. Укажем лишь, что отмеченному на рис. 3.2 максимуму модуля сдвига  $S$  при  $\theta_1 \approx 38^\circ$  (а также экстремумам  $\varepsilon_{1,2}$ ) соответствует ориентация нормали  $N_d \parallel \xi_2 + \xi_1 k$ , близкая к  $[334]_c$  (однако точного равенства пары индексов нет), при ориентациях собственных

векторов  $\xi_1$  и  $\xi_2$ , заметно отклоняющихся, соответственно, от осей  $[110]_c$  и  $[001]_c$ . А именно, при  $L_1=7000$ ,  $L_2=10000$ ,  $\theta_1 \approx 38^\circ$ ,  $R=1500$ :

$$\begin{aligned} N_d(\theta_1) &|| [0.511653 \ 0.511927 \ 0.690030]_c, \\ \xi_{1d}(\theta_1) &= [-0.825991 \ -0.563009 \ -0.0275563]_c, \\ \xi_{2d}(\theta_1) &= [0.133412 \ -0.147764 \ -0.979983]_c, \\ \xi_{3d}(\theta_1) &= [0.547667 \ -0.813134 \ 0.197164]_c. \end{aligned} \quad (3.17)$$

Корень из отношения собственных значений тензора деформаций при этом имеет величину  $k_d(\theta_1) \approx 1.0676915$ .

### 3.4.2. Отыскание управляющего волнового процесса, наследующего тензор деформации поля ДЦЗ

Реализуя алгоритм, описанный в п. 3.3, можно убедиться, что наследованию тензора деформации поля ДЦЗ соответствует УВП с ориентацией волновых нормалей,

$$\begin{aligned} N_w(\varphi^*, \omega_1^*) &|| [0.511653 \ 0.5119270 \ 0.690030]_c \\ \mathbf{n}_1 &= [-0.826446 \ -0.563262 \ 0.005052]_c, \\ \mathbf{n}_2 &= [0.103480 \ -0.160781 \ -0.981561]_c, \\ \mathbf{n}_3 &= [0.553423 \ -0.810685 \ 0.191079]_c, \end{aligned} \quad (3.18)$$

отвечающих углам поворота  $\varphi^* \approx 0.5^\circ$ ,  $\omega_1^* \approx 1.836^\circ$  причем первое из соотношений (3.18) выполняется при совпадении трех значащих цифр (и близости четвертых цифр) для  $\varkappa \approx 0.9582$ . Интересно, что имеется еще одно решение, для отрицательного значения угла поворота  $\omega_2^* \approx -4.375^\circ$  при  $\varkappa \approx 0.953$

$$\begin{aligned}
N_w(\varphi^*, \omega_2^*) &|| [0.511653 \ 0.5119270 \ 0.690030]_c \\
n_1 &= [-0.810399 \ -0.0578708 \ -0.101173]_c, \\
n_2 &= [0.192286 \ -0.099269 \ -0.976346]_c \\
n_3 &= [0.553423 \ -0.810685 \ 0.191079]_c.
\end{aligned} \tag{3.19}$$

В обоих случаях (3.18) и (3.19) параметр  $\varkappa$  заметно отличается от  $k_d(\theta_1) \approx 1.068$ .

Полученные результаты демонстрируют реализацию наследования тензора упругого поля ДЦЗ управляющим волновым процессом.

Полезно отметить, что отношение  $k_d = k_w > 1$ , тогда как  $\varkappa < 1$ , что, однако, согласуется с (3.14). В приведенном примере не ставилась цель детального сравнения ожидаемых  $k_d = k_w$  и наблюдаемых значений  $k_e$ . Тем не менее, напомним, что наблюдавшимся в [108] значениям параметров решетки сопоставляется  $k_e \approx 1.0432 > 1$ , соответствующее отношению деформаций вдоль осей симметрии исходной решетки (в рассматриваемом примере - это оси  $[110]_c$  и  $[001]_c$ ). Строго говоря, сравнивать между собой следует  $k_d(\theta_1)$  и отношение  $k'_e$  деформаций вдоль осей  $\xi_{1d}(\theta_1)$  и  $\xi_{2d}(\theta_1)$ . Используя формулы для пересчета деформаций (см., например, (55) в [80, 81]), получим  $k'_e \approx 1.0413$ . Хотя значение  $k'_e$  меньше использованного нами в качестве примера  $k_d(\theta_1) \approx 1.068$ , не вызывает сомнений, что (при наличии ДЦЗ рассмотренного типа) путем уточнения упругих модулей системы, параметров решетки, параметров дислокационной петли и координат  $R$  и  $\theta$  области локализации НВС можно обеспечить практическое совпадение значений  $k_d(\theta_1)$  и  $k'_e$ .

Напомним, что в [50,51] при рассмотрении в приближении продольных волн (приемлемом для описания поля ДЦЗ с краевой ориентацией вектора Бюргерса) отношение пороговых деформаций в волновом режиме принималось равным  $\varkappa^2 \approx 0.8872$ , то есть использовался параметр  $k_d \approx 0.9419 \approx \varkappa < 1$ . Это естественно приводило к быстро возникающему промежуточному состоянию с последующим более

медленным нарастанием финальной деформации растяжения. Полученные здесь результаты свидетельствуют о возможности сохранения отношения деформаций, заданных в пороговом режиме, вплоть до финальной стадии при учете ДЦЗ с другой ориентацией векторов Бюргерса.

Таким образом, вывод динамической теории о совпадении отношений пороговых и финальных деформаций, сделанный ранее при рассмотрении ОЦК-ГПУ МП в титане [41, 42] и ГЦК-ОЦТ МП в сплавах железа, может быть сохранен и применительно к В2-В19 МП в сплавах на основе никелида титана при учете квазипродольности управляющих волн, позволяющей обеспечить наследование информации о характере поля деформации в области локализации НВС. Заметим, что при наличии нескольких типов ДЦЗ сохраняет силу и сценарий [50, 51] протекания МП через промежуточное мезоскопическое состояние с уточненным, согласно (3.9), соотношением между  $\alpha$  и  $k$ .

### **3.5 Наследование тензора деформации упругого поля ДЦЗ управляющим волновым процессом в железо-никелевом сплаве**

#### **3.5.1. Вводные замечания**

Несмотря на то, что в п. 3.4 на примере МП В2-В19 в сплавах Ti-Ni-10Cu-2Fe (использовался набор упругих модулей для этого сплава) показана возможность наследования упругого поля ДЦЗ волновым процессом, следует иметь в виду, что практическое выполнение соотношения (3.14) для связи между  $k_w$  и  $\alpha$  не является очевидным. Поэтому для выявления возможных вариантов наследования упругого поля ДЦЗ необходимо проводить расчеты для различных сплавов, накапливая информацию для сопоставления с экспериментом. В данном разделе демонстрируется реальность наследования упругого поля ДЦЗ волновым процессом на примере  $\gamma$ - $\alpha$  МП в сплавах Fe-Ni. Этот случай представляет несомненный интерес, так как набор упругих модулей, характер роста кристаллов и тип габитусов кристаллов, выбираемых для

сравнения, существенно отличаются от рассмотренного в п. 3.4 варианта МП.

В качестве дополнения к алгоритму, изложенному в п.3.3, отметим, что при отборе вариантов прямого наследования характера упругого поля ДЦЗ управляющим волновым процессом предпочтение должно отдаваться случаям с наименьшими значениями пар углов  $\varphi^*$ ,  $\omega^*$ . Следует, однако, иметь в виду, что вариант, при котором угол  $\varphi^*$  мал, а  $\omega^*$  близок к  $90^\circ$  также физически приемлем. Действительно, при  $\varphi^*=0$  и  $\omega^*=90^\circ$  ориентации ортогональных осей растяжения и сжатия просто меняются местами. В динамическом (колебательном) состоянии в области локализации НВС подобная смена происходит через полпериода колебаний, причем значения параметра  $k_w$  в моменты времени, отличающиеся на половину периода взаимно обратны. Это обстоятельство специально отмечалось в [109].

Следовательно, вариант малых  $\varphi^*$  и  $\omega^*$  близких к  $90^\circ$  также должен учитываться при сравнительном отборе вариантов наследования поля ДЦЗ. Очевидно, что при такой интерпретации отбор предпочтительного варианта наследования должен учитывать при сравнении не только малость параметра  $|\omega^*|$ , но и возможную малость  $|\omega^*-90|$ .

### **3.5.2. Данные расчета упругого поля ДЦЗ в форме прямоугольной петли с вектором Бюргерса $[01\bar{1}]_\gamma$ смешанной ориентации относительно основного сегмента петли $[11\bar{2}]_\gamma$**

Напомним, еще в [30] было показано, что описание габитусов кристаллов  $\alpha$ -мартенсита близких  $\{31015\}_\gamma$  при  $\gamma$ - $\alpha$  МП в сплавах Fe-Ni на примере ДЦЗ с линиями  $\Lambda \parallel \langle 11\bar{2} \rangle_\gamma$  и векторами Бюргерса смешанной (30-градусной) ориентации  $\langle 011 \rangle_\gamma$ , может быть достигнуто в рамках динамической теории. Выберем ДЦЗ в форме прямоугольной петли с размерами (в единицах параметра решетки  $a$ )  $L_1 = 7 \cdot 10^3$  вдоль основных сегментов  $A_1 \parallel [11\bar{2}]_\gamma$  и  $L_2 = 10^4$  - вдоль  $A_2 \parallel [111]_\gamma$ . Фиксация

цилиндрической системы отсчета в пространстве по отношению к прямоугольной дислокационной петле, ориентации сторон которой задаются единичными векторами  $\tau_1$  и  $\tau_2$ , та же, что и приведенная на рис. 3.1.

На рис. 3.3 представлены угловые зависимости характеристик упругого поля ДЦЗ при  $R=1200$  и векторе Бюргерса  $[01 \bar{1}]_\gamma$ , рассчитанные для упругих модулей (на основе данных в [93]) сплава Fe-Ni (в единицах ТПа):

$$C'=0.027, C_L=0.218, C_{44}=0.112. \quad (3.20)$$

Цифры соответствуют значениям угловой переменной  $\theta$  (в градусах). Так как для анализа важны, в первую очередь, угловые локализации для экстремумов  $\varepsilon_{1,2}$  (и соответствующие им ориентации собственных векторов), абсолютные значения  $\varepsilon_{1,2}$  нами не указываются, используется масштаб, удобный для восприятия. С учетом того, что тип пороговой деформация предполагается близким к деформации со слабоискаженной плоскостью, предпочтение сразу можно отдать интервалу углов  $\theta$ , включающему значения  $(-67^\circ, -62^\circ)$  с малыми значениями  $|\varepsilon_3|$ .

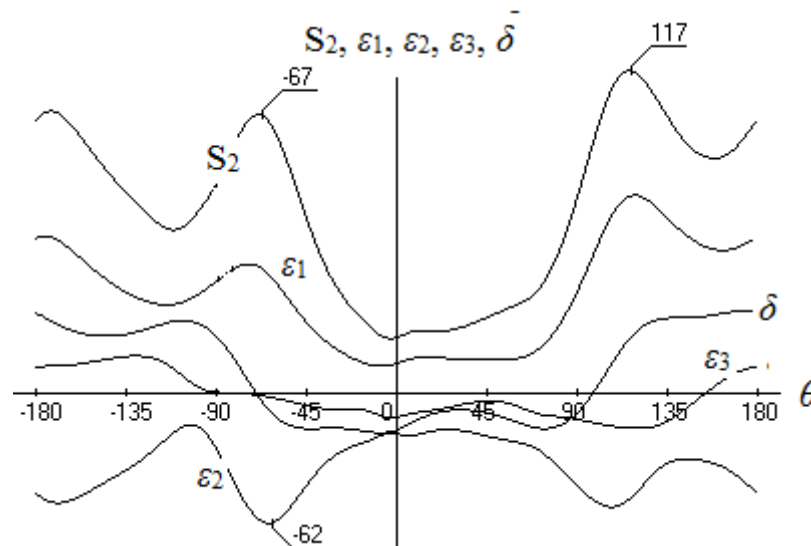


Рис. 3.3. Угловые зависимости модуля сдвига  $S_2$  (обеспечивающего отбор габитусов с нормалью  $N_2$ ), собственных чисел  $\varepsilon_{1,2,3}$  тензора деформаций, а также относительного изменения объема  $\delta$  для упругого поля дислокационной петли при векторе Бюргерса  $\parallel [01 \bar{1}]_\gamma$  для  $R = 1200$ .

Поэтому достаточно привести данные расчета упругого поля ДЦЗ для угла из выбранного интервала. Так, полагая  $\theta_1 \approx -62^\circ$ , находим, что (в приближении небольших целочисленных индексов) ориентация нормали  $N_2 \parallel \xi_2 - \xi_1 k \parallel N_{d2}$ , близка к  $[3 \ 14 \ 10]_\gamma$  при ориентациях собственных векторов  $\xi_1$  и  $\xi_2$ , тяготеющих, соответственно, к осям  $[001]_\gamma$  и  $[010]_\gamma$ . А именно, при  $L_1=7000$ ,  $L_2=10000$ ,  $\theta_1 \approx -62^\circ$ ,  $R=1200$ :

$$\begin{aligned} N_d(\theta_1) &\parallel [0.168180 \ 0.793936 \ 0.584278]_\gamma \\ \xi_{1w}(\theta_1) &= [-0.276662 \ -0.0986335 \ -0.955892]_\gamma, \\ \xi_{2w}(\theta_1) &= [-0.0285925 \ 0.995123 \ -0.0944061]_\gamma, \\ \xi_{3w}(\theta_1) &= [0.960542 \ 0.00121274 \ -0.278133]_\gamma. \end{aligned} \quad (3.21)$$

Расчет собственных чисел дает, согласно (3.5), для корня из отношения деформаций величину  $k(\theta_1) \approx 0.936041$ . Реализуя алгоритм, описанный выше, можно убедиться, что наследованию тензора деформации поля ДЦЗ соответствует УВП, включающий волновые пучки с нормальными  $n_{1,2}(\theta_1)$  и приводящий к габитусам  $N_w(\theta_1) = N_w(\varphi_1^*, \omega_1^*) = N_d(\theta_1)$ , ориентации которых имеют вид:

$$\begin{aligned} N_w(\theta_1) &\parallel [0.168180 \ 0.793936 \ 0.584278]_\gamma \\ n_1(\theta_1) &= [-0,282381 \ 0,109594 \ -0,953022]_\gamma, \\ n_2(\theta_1) &= [-0,037422 \ 0,993955 \ -0,103213]_\gamma, \\ n_3(\theta_1) &= [0,958572 \ 0,006518 \ -0,284776]_\gamma. \end{aligned} \quad (3.22)$$

Эти ориентации соответствуют углам поворота  $\varphi_1^* \approx 0.50^\circ$ ,  $\omega_1^* \approx 0.63^\circ$  при значениях  $k(\theta_1) \approx 0.936$  и  $\varkappa(\theta_1) \approx 0.957$ . Близость значений  $k(\theta_1)$  и  $\varkappa(\theta_1)$  не случайна, так как направления  $\xi_{1w}(\theta_1)$  и  $\xi_{2w}(\theta_1)$  близки, согласно (3.21) и (3.22), соответственно к  $n_1$  и  $n_2$ , и, что важно, к паре ортогональных осей симметрии четвертого порядка. Это и диктует качественное соответствие с приближением (3.5).

### 3.5.3. Обсуждение результатов

Полученные результаты демонстрируют возможность прямого наследования тензора деформации упругого поля ДЦЗ управляющим волновым процессом при формировании кристаллов с габитусами, близкими  $\{3\ 15\ 10\}_\gamma$ , которые наблюдаются [1] в железо-никелевых сплавах ((30-33)%Ni).

Хотя мы заранее отобрали предпочтительный интервал углов, полезно для сравнения привести расчеты для угла  $\theta_2=117^\circ$ , соответствующего максимуму сдвига  $S_2$  (см. рис.3.3). Интересно, что изложенный выше алгоритм в этом случае приводит к малому углу  $\varphi_2^*\approx 0.18^\circ$  и большому значению угла поворота  $\omega_2^*\approx 79.33^\circ$ . Ясно, что сравнительная близость  $\omega_2^*$  к  $90^\circ$  практически соответствует взаимной перестановке ориентаций осей растяжения и сжатия в упругом поле УВП по отношению к ориентациям  $\xi_1(\theta_2)$  и  $\xi_2(\theta_2)$  исходного упругого поля ДЦЗ. В результате, возникающие ориентации

$$\begin{aligned}
 N_w(\theta_2) &|| [0,125207\ 0,888429\ 0,441607]_\gamma \\
 n_1(\theta_2) &= [0,268824\ 0,334050\ 0,903407]_\gamma, \\
 n_2(\theta_2) &= [-0,103596\ 0,942520\ -0,317686]_\gamma, \\
 n_3(\theta_2) &= [-0,957602\ -0,008188\ 0,287978]_\gamma,
 \end{aligned} \tag{3.23}$$

оказываются качественно сходными с приведенными в (3.22), но при значениях параметров  $\varkappa(\theta_2) \approx 1.066$  и  $k(\theta_2) \approx 1.368$ . То обстоятельство, что  $k(\theta_1) < 1$  и  $\varkappa(\theta_1) < 1$ , тогда как  $\varkappa(\theta_2) > 1$  и  $k(\theta_2) > 1$ , соответствует отмечавшемуся выше варианту динамического наследования, при котором значения параметра  $k_w$  (как и значения  $\varkappa$ ) следует считать взаимно обратными в моменты времени, отличающиеся на половину периода колебаний.



При сравнении вариантов (3.22) и (3.23) видим, что вариант (3.22) предпочтительнее, так как при сопоставимых небольших значениях  $\varphi_1^*$  и  $\varphi_2^*$ , величина  $|\omega_2^* - 90^\circ|$  существенно превышает  $\omega_1^*$ .

Таким образом, требование наследования упругого поля ДЦЗ управляющим волновым процессом дает дополнительный критерий для отбора областей локализации НВС в упругом поле ДЦЗ.

Полезно отметить также, что различие параметров  $k_w$  и  $\alpha$  при учете квазипродольности волновых пучков совершенно естественно и соответствует более общему, по сравнению с (3.1) и (3.5), соотношению (3.14).

Полезно иметь в виду, что в динамической теории МП ставится вопрос не только о наследовании управляющим процессом упругого поля ДЦЗ, но и о сохранении (наследовании) отношения деформаций растяжения и сжатия, задаваемого в пороговом режиме, при переходе к итоговым деформациям, которые превышают пороговые на два-три порядка. Вопрос о мере справедливости этого вывода для различных вариантов МП следует решать при сравнении ожидаемых  $k = k_w$  и наблюдаемых значений  $k_e$  (при выборе деформаций вдоль одних и тех же кристаллографических направлений). В данной работе эта цель не ставилась. Тем не менее, результаты, полученные для ОЦК-ГПУ МП в титане [39, 40], ГЦК-ОЦТ МП в сплавах железа [80,81], как и для В2-В19 МП в сплавах на основе никелида титана при учете наследования поля ДЦЗ (см. п. 3.4), показывает реальность сохранения отношения деформаций, заданного в пороговом режиме.

### 3.6 Заключение к главе 3

1. Выполненный анализ показывает, что возможность наследования волновым процессом, управляющим ростом мартенситного кристалла, упругого поля, создаваемого дислокационным центром зарождения, реализуется и в общем случае, когда пары собственных векторов тензора

плоской деформации и волновых нормалей лежат в разных плоскостях. Механизм наследования оказывается допустимым даже для железо - никелевых сплавов. Как известно, эти сплавы относятся к признанным «эталонам» при реализации тонкопластинчатой либо линзовидной (с тонким мидрибом) морфологии мартенсита при  $\gamma$ - $\alpha$  МП. Причем для  $\gamma$ - $\alpha$  МП характерен высокий уровень финальных деформаций.

2. Полученные результаты демонстрируют расширение спектра ориентаций волновых нормалей волновых пучков в составе УВП, включая в качестве важного случая вариант точного наследования характеристик упругого поля ДЦЗ в области локализации начального возбужденного состояния. Для целей морфологического анализа существенно расширение интервалов ориентаций габитусных плоскостей мартенситных кристаллов, сопоставляемых одному и тому же ДЦЗ.

3. Проведенные расчеты показали, что в случае учета квазипродольного характера волн в составе УВП возможен прецизионный анализ, связанный с учетом точного соотношения (3.14) между отношением деформаций и отношением скоростей волн. Это имеет принципиальное значение при уточнении сравнения выводов динамической теории с наблюдаемыми морфологическими признаками, в частности, для проверки сохранения указанного соотношения при переходе от пороговых деформаций к финальным.

4. При сравнении отношений пороговых деформаций с экспериментальными данными для финальных деформаций требуется проводить пересчет от системы координат с базисом из волновых нормалей к кристаллографической системе координат, что также вносит вклад, приводя к ожидаемым в эксперименте значениям.

5. Открывается возможность перехода к новому этапу количественного анализа всех стадий формирования мартенситных кристаллов, начиная от возникновения НВС и вплоть до достижения финальных деформаций,

причем не только в сплавах на основе железа, но и в сплавах на основе никелида титана, обладающих эффектом памяти формы, поскольку точное наследование упругого поля ДЦЗ создает необходимые условия как для термо- так и магнитоупругого эффектов в случаях сравнительно невысоких собственных деформаций превращения, сохраняющих в значительной степени когерентность сопряжения фаз.

6. Введение тензора деформаций, сопоставляемого УВП, расширяет возможности динамической теории реконструктивных мартенситных превращений, как для идентификации ДЦЗ, так и прогнозирования результатов экспериментальных исследований, с использованием, например, предлагавшегося еще в [110] метода инициации роста отдельного мартенситного кристалла импульсным лазерным воздействием на ориентированную поверхность монокристаллического образца.

7. В методическом отношении расчеты упругих полей базировались на программе ElasticPro, включающей в себя конструктор системы дефектов и расчетную часть [111], развитую, в свою очередь, в рамках классической методологии теории упругости [112]. Алгоритм восстановления волновых нормалей управляющих волн, при условии наследования тензора упругого поля ДЦЗ управляющим волновым процессом (изложенный в п. 3.3), реализован в качестве отдельного дополнительного блока к программе ElasticPro.

Для расчетов был использован пакет MatLab. Листинг использованной для расчета программы приведен в приложении А.

Результаты, полученные в главе 3, опубликованы в [113-116].

## Глава 4. Идентификация ДЦЗ кристаллов с габитусами типа $(hh\ell)$ при нетипичном соотношении индексов Миллера $h>\ell$ и уточнение правил морфологического перехода от кристаллов с габитусами $\{557\}_\gamma$ к $\{225\}_\gamma$

### 4.1 Вводные замечания

Успешное решение основных проблем МП позволяет, с одной стороны, ставить новые задачи, такие как описание реальной нерегулярной структуры двойников превращения (см. главу 2), наследования упругого поля дефекта в области локализации НВС (см. главу 3), а с другой стороны, интерпретировать полученные ранее в металлографических исследованиях результаты. Одной из интересных проблем является интерпретация причин появления кристаллов с габитусами типа  $(hh\ell)$  при  $h>\ell$ . Такие габитусы наблюдаются, например, в титане  $[117]$  (габитусы  $(443)_\alpha$ , наряду с чаще наблюдаемыми габитусами  $(334)_\alpha$ ), при формировании бейнита в сталях  $[118, 119]$  (габитусы  $(774)_\gamma$ , наряду с чаще наблюдаемыми габитусами  $(558)_\gamma$ ), при МП в цветных сплавах  $[120]$ , что наиболее интересно, в железо никелевых сплавах (31–32% Ni) после предварительной пластической деформации  $[121]$  (габитусы близкие  $(233)_\gamma - (3310)_\gamma$ ). Напомним, что стандартными ориентировками габитусов для таких сплавов являются  $(3\ 10\ 15)_\gamma$ .

Именно последнему варианту здесь уделено наибольшее внимание, поскольку в материалах, испытавших предварительную интенсивную пластическую деформацию, возможно формирование новых или модификация известных ДЦЗ. Так, согласно  $[121]$ , для сплавов Fe–31.5%Ni и Fe–32%Ni, которые подвергнуты закалке после проведения предварительной пластической деформации аустенита при растяжении на (8–25)% и прокатки на (20–50)% при комнатной температуре (температуры  $M_s$  для сплавов такого состава ниже комнатной), наблюдаются габитусы и ориентационные соотношения (ОС), указанные в табл. 4.1. Сокращения Г–Т, Н, К–З относятся соответственно к авторам

Гренингер-Трояно, Нишияма, Курдюмов-Закс. Все кристаллографические обозначения даются в базисе исходной  $\gamma$  (ГЦК) фазы.

Таблица 4.1. Габитусы и ОС для мартенсита охлаждения после пластической деформации

Габитус	$(259)_{\gamma}$	$(233)_{\gamma}$	$(3\ 10\ 11)_{\gamma}$	$(123)_{\gamma}$	$(012)_{\gamma}$
ОС	Г–Т	Н	Н	К–З	К–З

Полезно отметить, что при отсутствии предварительной интенсивной пластической деформации для кристаллов МО сплавов с указанными составами, можно наблюдать только ОС Г–Т. То, что в случае предварительной интенсивной пластической деформации одновременно присутствуют несколько типов ОС было изначально установлено в [121], но тогда не был указан спектр габитусных плоскостей, что, вероятно, простимулировало работу [121] с бо́льшим объемом найденной кристаллографической информации.

Рассмотрим данные из табл. 4.1. Набор данных о габитусе  $(259)_{\gamma}$  и о соотношениях Г–Т, без сомнения, можно считать стандартным вариантом формирования мартенсита охлаждения (МО) с участием  $30^{\circ}$  смешанной дислокации, которая имеет линию  $[1\bar{2}1]_{\gamma}$ . Данная линия, как отмечалось, к примеру, в  $[101]_{\gamma}$ , может являться основным элементом дислокационной петли. Габитус, который близок к  $(123)_{\gamma}$ , при выполнении условия перпендикулярности плоскости, входящей в ОС К–З, габитусу, по всей видимости, связан с появляющимися в процессе деформации ДЦЗ с линиями  $\langle 111 \rangle_{\gamma}$ , для которых может выполняться случай быстрого роста, обусловленного деформациями плоскостей, входящих в ОС. Данный случай первоначально был рассмотрен в [80, 81], когда были выбраны оси растяжения и сжатия строго вдоль направлений  $[110]_{\gamma}$  и  $[11\bar{2}]_{\gamma}$  в приближении продольных волн, а затем в [123] анализировался более

реалистичный вариант и найдена нормаль к габитусу (в приближении сравнительно небольших целочисленных индексов) с ориентировкой  $[8\bar{1}13]_{\gamma}$ , составляющая с  $[2\bar{3}1]_{\gamma}$  угол  $\approx 4.34^{\circ}$ . Качественный анализ причин появления габитусов  $(012)_{\gamma}$  и  $(013)_{\gamma}$  проводился в [86].

Ниже в п. 4.2 в рамках методологии динамической теории рассматривается идентификация вероятных ДЦЗ для кристаллов с габитусами  $(233)_{\gamma}$ ,  $(31010)_{\gamma}$ , используя реальные значения упругих модулей.

Сходный вопрос о реализации габитусов близких  $(774)_{\gamma}$  для кристаллов бейнитного феррита рассматривается в п.4.3.

И, наконец, п. 4.4 дополняет современной информацией анализ причин морфологического перехода от кристаллов мартенсита с габитусами  $\{557\}_{\gamma}$  к кристаллам с габитусами  $\{225\}_{\gamma}$

#### **4.2 Дислокационные центры, инициирующие формирование кристаллов мартенсита охлаждения с габитусами $\{233\}_{\gamma}$ и $\{31010\}_{\gamma}$**

В качестве ожидаемых ДЦЗ для мартенситных кристаллов с габитусами  $(332)_{\gamma}$  естественно рассматривать дислокационные петли, основные сегменты которых коллинеарны направлению  $\Lambda_1 \parallel [1\bar{1}0]_{\gamma}$ , а векторы Бюргерса имеют краевую по отношению к  $\Lambda_1$  ориентацию. В силу того, что плоскости  $\{110\}_{\gamma}$  являются плоскостями симметрии, пара собственных векторов тензора деформации  $\xi_{1,2}$  упругого поля такого ДЦЗ (соответствующая главным значениям растяжения  $\varepsilon_1 > 0$  и сжатия  $\varepsilon_2 < 0$ ) должна принадлежать плоскости с нормалью  $\Lambda_1$ , а третий вектор  $\xi_3$  (для  $\varepsilon_3 = 0$ ) должен быть коллинеарен  $\Lambda_1$  (по крайней мере для точек, удаленных от концов основных сегментов ДЦЗ). В результате, НВС, локализующееся в таком поле, будет порождать УВП с парами волновых нормалей  $\mathbf{n}_{1,2}$  и скоростями  $\mathbf{v}_{1,2}$  продольных волн, лежащими в той же

плоскости, что и векторы  $\xi_{1,2}$ . Тогда нормаль  $\bar{n}_w$  к плоскости габитуса, задаваемая УВП, в простейшем случае  $\xi_{1,2} = \mathbf{n}_{1,2}$  дается формулой (3.2).

В общем случае  $\xi_{1,2} \neq \mathbf{n}_{1,2}$ , однако, учитывая возможность наследования волновым процессом тензора деформации упругого поля ДЦЗ в области локализации НВС (см. главу 3), ориентация  $\bar{n}_w$  может совпадать с (3.1)

Таким образом, ориентировки  $\bar{n}_w$  могут испытывать вариации, как минимум в пределах, задаваемых (3.1) и (3.2), и имеют вид  $\{hh\ell\}_\gamma$ . Упругие поля ДЦЗ рассчитываются для железоникелевых сплавов с упругими модулями (в ТПа), взятыми из [93] для сплава Fe-31Ni при температуре 239К:  $C_L = 0,218$   $C_{44} = 0,112$   $C' = 0.027$ .

ДЦЗ выбирались в форме прямоугольных петель с основными сегментами вдоль  $\Lambda_1$  и дополнительными вдоль  $\Lambda_2 \parallel [110]_\gamma$ . Выбор ориентации осей цилиндрической системы координат совпадает с приведенной ранее на рис. 3.1.

Следует отметить, что ранее в основном рассматривались широкие петли, позволяющие удовлетворить неравенства  $1 \ll R \sim 0.1 L_2 < 0.5 L_2$  ( $R$  и размер сегмента петли  $L_2$  вдоль  $\Lambda_2$  задаются в единицах параметра решетки  $a$ ), при которых основной вклад в упругое поле ДЦЗ дает один из двух основных сегментов петли. Тогда отбор ожидаемых габитусов безальтернативно осуществляется в пользу габитусов  $\{hh\ell\}_\gamma$  при  $h < \ell$ , поскольку величина макросдвига  $S$  (один из критериев отбора) для таких габитусов заметно превышает величину  $S$  для габитусов  $\{hh\ell\}_\gamma$  при  $h > \ell$ . Однако в случае узких петель, различия значений  $S$  уменьшаются, угловые координаты локализации НВС сближаются, и следует учитывать дополнительные критерии. Продемонстрируем сказанное, выбирая размеры петли  $L_1 = 7000$ ,  $L_2 = 500$ ,  $R = 1200$  при векторе Бюргерса  $\mathbf{b} \parallel [11-3]_\gamma$ . Результаты расчета, включающие область углов  $\theta$  с наибольшими

значениями характеристик упругого поля ДЦЗ, существенных для анализа, представлены на Рис. 4.1.

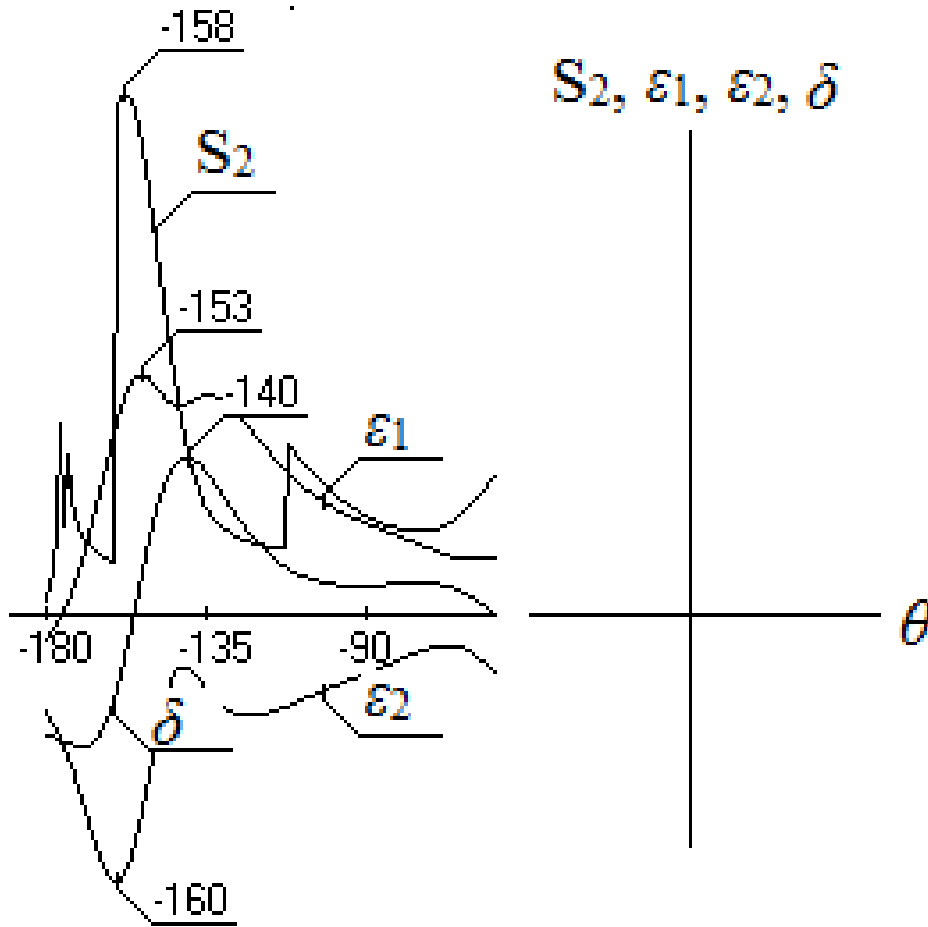


Рис. 4.1. Угловые зависимости модуля сдвига  $S_2$  (обеспечивающего отбор габитусов с нормальными  $N_2$ ), собственных чисел  $\epsilon_{1,2}$  тензора деформаций и относительного изменения объема  $\delta$  упругого поля дислокационной петли.

На рис. 4.1 цифры соответствуют значениям угловой переменной  $\theta$  (в градусах), используется масштаб, удобный для восприятия. В интересующем нас диапазоне углов  $-158^\circ \leq \theta \leq -140^\circ$ , границы которого соответствуют максимумам значений  $S_2 = S_{2m}$  и  $\delta = \delta_m$ , для всех углов выполнено условие существования инвариантной плоскости ( $\epsilon_1 > 0$ ,  $\epsilon_2 < 0$ ,  $\epsilon_3 = 0$ ). Значит, соображения, связанные с использованием этого критерия отбора, не дают дополнительной информации. Поскольку  $\gamma$ -а МП происходит с увеличением удельного объема, можно ожидать, что



наблюдаемым габитусам будут соответствовать области локализации НВС, расположенные внутри указанного интервала углов, когда между требованиями максимизации параметров  $S_2$  и  $\delta$  устанавливается паритет. В связи с этим представляется полезным рассмотреть угловую зависимость произведения

$$S'_2 \delta' = (S_2 / S_{2m}) (\delta / \delta_m). \quad (4.1)$$

В приложении Б приведена расчетная информация характеристик упругого поля ДЦЗ для углов, соответствующих экстремумам  $S_2$ ,  $\varepsilon_1$ ,  $\delta$  на рис. 4.1, а также ориентациям нормалей  $N_2$  (1) и  $N_2$  (2), близким к наблюдаемым  $[332]_\gamma$  и  $[11\ 10\ 3]_\gamma$ . Там же содержатся данные о величинах  $S'_2$ ,  $\delta'$  и их произведении  $S'_2 \delta'$ . Заметим, что данным при  $\theta \approx -147.3^\circ$  в приложении Б отвечает максимум произведения  $S'_2 \delta'$ . Кроме того, для удобства восприятия, наряду с проекциями единичных векторов нормалей  $N_2$ , приводится запись их ориентаций в приближении небольших целочисленных индексов. При использованной ориентации вектора Бюргерса иницируются только кристаллы с габитусами типа  $\{hh\ell\}_\gamma$ . В равной мере в таблице можно было бы указать и варианты ориентаций  $[11\ 11\ 3]_\gamma$ , которым соответствуют углы, близкие к значениям, приведенным в приложении Б для ориентировок  $[10\ 10\ 3]_\gamma$ .

Из приложения Б следует, что близкие к наблюдаемым ориентировки габитусов  $\{hh\ell\}$  при  $h > \ell$  сопоставляются с областью углов, тяготеющей к максимуму мультиплицированного параметра  $S'_2 \delta'$ . Максимуму сдвига при  $\theta \approx -158^\circ$  соответствуют кристаллы с габитусами  $\{hh\ell\}_\gamma$  при  $h < \ell$  (типа  $(557)_\gamma$  -  $(558)_\gamma$ ), которые естественно возникают при формировании пакетного мартенсита [36], но в рассматриваемом случае по фактору  $\delta$  уступают кристаллам с габитусами при  $h > \ell$ . Напомним, что ранее [124] один из сценариев возникновения кристаллов бейнитного феррита с габитусами  $\{hh\ell\}$  при  $h > \ell$  (близких к  $(774)_\gamma$ ) также связывался с влиянием фактора  $\delta$ . Однако условие узости петель, заметно расширяющее область

углов  $\theta$  для локализации НВС и последующей реализации подобных габитусов, впервые кратко отмечено в [125].

При выполнении ОС Нишиямы имеются основания считать [43], что пара волновых пучков с нормальными в плоскости  $(110)_\gamma$  инициирует наиболее быструю деформацию таких плоскостей, приводя к латентным ОС, трансформирующимся в ОС Нишиямы. Из данных приложения Б видно, что для габитусов при  $h > \ell$  характерно значительное отклонение собственных векторов тензора деформации упругого поля ДЦЗ от осей симметрии второго и четвертого порядка. Как показывает анализ, нарастание отклонения от осей симметрии должно приводить к росту финишных значений главных деформаций, а следовательно, к росту величины макросдвига по сравнению со случаем кристаллов, имеющих габитусы  $\{hh\ell\}_\gamma$  при  $h < \ell$ .

В качестве менее вероятного можно отметить кристонный механизм возникновения кристаллов с габитусов  $\{hh\ell\}_\gamma$  при  $h > \ell$ , связанный с релаксацией в процессе охлаждения полей напряжений мезоконцентраторов (путем генерации кристонов, см. например, [126]), возникших на стадии предшествующей интенсивной пластической деформации.

Отметим, наконец, накопленный при идентификации ДЦЗ в рамках методологии динамической теории МП опыт показывает, что ориентации габитусов вида  $(10\ 11\ 3)_\gamma$  и  $(10\ 11\ 3)_\gamma$  легко получаются для тех же конфигураций дислокационной петли в случае добавления винтовой компоненты у вектора Бюргерса (по отношению к основным сегментам  $[1-10]_\gamma$  дислокационной петли). Подобная модификация вектора Бюргерса на стадии интенсивной пластической деформации может возникать при стандартных дислокационных реакциях.

### 4.3 Формирование дополнительной компоненты бейнитного феррита с габитусом, близким $\{774\}_\gamma$

В разделе 4.3 будет проведено рассмотрение упругих полей вероятных дислокационных центров зарождения речных компонент, которые наблюдаются у макропластин бейнитного феррита. Мы покажем, что дополнительной компоненте с габитусом  $\{774\}_\gamma$  естественно сопоставляется управляющий волновой процесс, который несет пороговую деформацию с инвариантной плоскостью.

Превращение бейнита в сталях принято относить к промежуточному типу [127]. Морфологические признаки речных компонент бейнита и мартенсита демонстрируют подобие форм этих кристаллов (и габитусов, близких к  $\{hh\ell\}_\gamma$  типу), можно также наблюдать сходство в образовании поверхностного рельефа, которое говорит нам о том, что в области речного кристалла идет формирование макросдвига, и, кроме того, образуются межфазные ориентационные соотношения. Наличие данных морфологических признаков, которые однозначно связаны между собой, является типичным для кооперативного случая превращения, происходящего с явными признаками мартенситной реакции [1]. Значит, существуют основания считать, что речные компоненты бейнита, в качестве отдельных кристаллов, формируются (во всяком случае, на начальном этапе) по варианту, аналогичному варианту формирования реек пакетного мартенсита. Однако, есть и отличительная особенность между речным пакетным мартенситом и макропластинами бейнитного феррита. В рамках одного пакета, в соответствии с [128], любой габитус кристаллов оказывается близким к ориентациям  $\{557\}_\gamma$ , в то время как в структуре макропластин бейнитного феррита с низкоуглеродистым исходным составом аустенита находятся субрейки с парой различных габитусов [118], следовательно, композиция речных кристаллов является бимодальной. Первый из габитусов, близкий к  $\{558\}_\gamma$ , очень близок к ориентации  $\{557\}_\gamma$ , которая типична для мартенсита. Второй же габитус,

по данным [119], имеет ориентацию  $\{0.663\ 0.649\ 0.373\}_\gamma$ , близкую, в приближении малых целочисленных индексов, к ориентации  $\{774\}_\gamma$ .

В соответствии с динамическим механизмом управления ростом кристаллов [99-102] будем считать, что возникновение отдельных реек происходит скачкообразно со сверхзвуковой скоростью, а при продолжительных (сравнительно с временем скачка) задержках происходит диффузия углерода, приводящая к появлению новых мест для зарождения реечных кристаллов и формированию карбидов [129].

В [124], [130] предлагались и обсуждались варианты возможных сценариев появления дополнительной реечной составляющей в макропластине бейнитного феррита. В первом сценарии предполагается реализация такого же варианта роста, как для главной компоненты, только в пластинчатой области аустенита, у которой есть двойниковая ориентация решетки по отношению к исходной ориентации. Другой сценарий сопряжен с изменением упругого поля дислокационного центра зарождения (ДЦЗ) при помощи упругого сжатия со стороны возникающей на предыдущем этапе рейки основной компоненты. Последний сценарий, отмеченный в [124] в ходе обсуждения рассчитанных характеристик упругого поля ДЦЗ кристонного типа, ставил в соответствие области локализации НВС для формирования кристаллов бейнита с габитусами  $\{774\}_\gamma$  область с максимальным значением относительного изменения объема. Но при таком сопоставлении габитус из семейства  $\{774\}_\gamma$  не будет составлять минимальный из вероятных углов с габитусом  $\{558\}_\gamma$  главной компоненты макропластины бейнитного феррита (индексы Миллера на соответствующих позициях не будут иметь одинаковых знаков). Такое расширение спектра ориентировок сильно отличается от закономерностей для пакетного мартенсита и, вероятно, не соответствует действительному расположению компонент для бейнитного феррита (см. рис. 4.2).

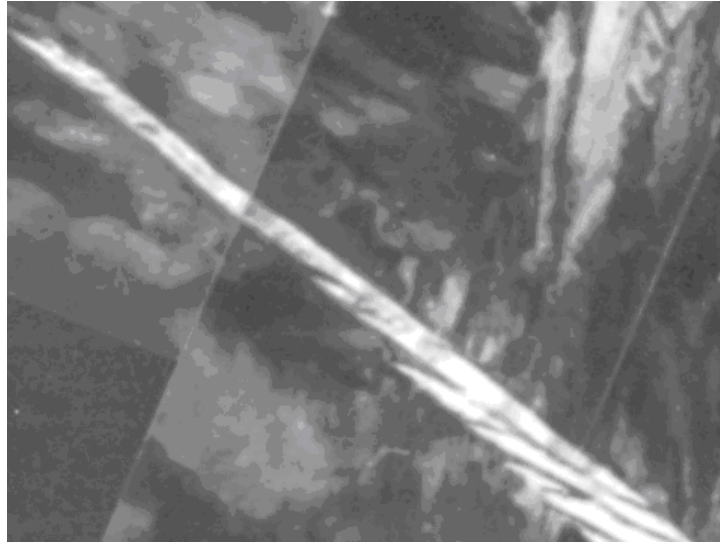


Рис. 4.2. Фрагмент пластины бейнитного феррита с бимодальным составом субреек (показана белым цветом) – часть рисунка 2.3 из [118]

В связи с этим здесь мы приводим результаты анализа упругих полей кристонных носителей сдвига, делая акцент как на максимальных значениях собственных чисел тензора деформаций, так и на критерии реализации кристаллов, начало волнового роста которых ассоциируется с такими локальными зонами, где упругие поля ДЦЗ характеризуются деформацией, обладающей инвариантной плоскостью. Также, как и в [111, 126], было проанализировано поле комбинации петель, которые моделируют деформацию простого сдвига со значением  $\text{tg}\psi$  вдоль плоскости  $(558)_\gamma$  (см.рис.4.3).

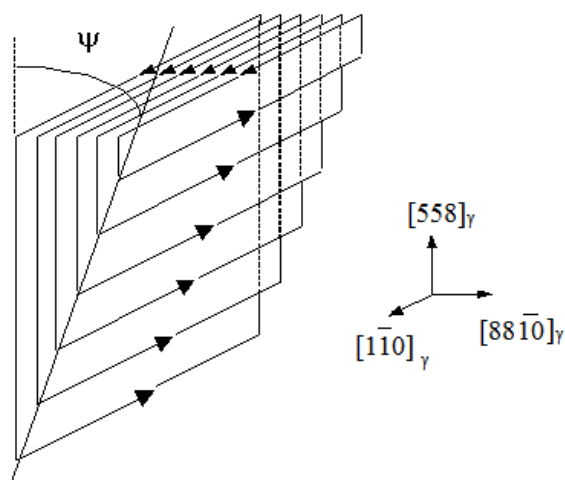


Рис. 4.3. Дислокационная модель кристона - носителя простого сдвига  $[111]$

Следует напомнить, что условием существования деформации с инвариантной плоскостью является противоположность знаков для двух главных деформаций и обращение в нуль третьей деформации. Проанализированные ранее примеры упругих полей базисных петель и их суперпозиций оказывались соответствующими случаям малоискаженных плоскостей, для которых модуль третьей главной деформации не равен нулю, хотя и существенно меньше модулей значений двух других деформаций.

В расчетах использовались упругие модули [93] монокристаллов аустенита сплава Fe-31.5Ni для температуры  $T = 673$  К  $C_L=0.2508$ ,  $C'=0.0271$ ,  $C_{44}=0.1034$  (в ТПа), которые, строго говоря, должны рассматриваться в качестве модельного набора значений. Цилиндрическая система координат была выбрана так же, как и в [111] (см.рис.4.4).

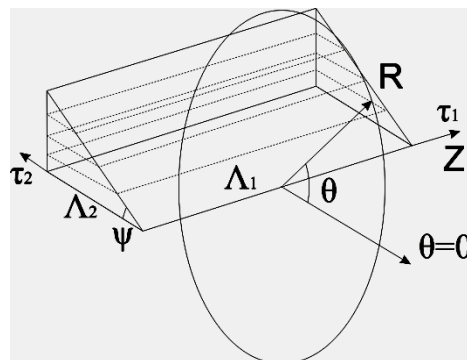


Рис. 4.4. Выбор системы координат при расчете упругого поля кристона

Ориентации направлений векторов на рис. 4.4 можно легко установить при сравнении с рис.4.3. Представим расчетную информацию об ожидаемой ориентации волновой нормали  $N_w$  к габитусной плоскости, выполненную по упрощенной методике, когда в роли единичных нормалей пары волновых пучков, управляющих формированием кристалла и задающих ориентацию его габитуса, используются направления собственных векторов тензора деформаций упругого поля ДЦЗ в области локализации НВС с координатами  $Z$ ,  $R$ ,  $\theta$ . Например, при  $Z=0$ ,  $R=2000$  (единица измерения - параметр решетки),  $\theta=-107^\circ$  критерий существования инвариантной плоскости выполняется и

дает нам к ориентацию  $N_w \parallel [0.66704 \ 0.66704 \ 0.33184]_\gamma$ , близкую к  $[221]_\gamma$ . Стоит заметить, что для  $\theta = -112^\circ$  мы получим  $N_w \parallel [0.65566 \ 0.65566 \ 0.37444]_\gamma$ , практически совпадающую с  $[774]_\gamma$ .

Исходя из выше изложенного, можно сказать, что, помимо с выдвигавшихся ранее сценариев, имеет место еще один. Проблемным моментом для данного сценария является значительный разворот собственных векторов тензора деформации от ориентаций осей симметрии аустенита, что требует увеличения уровней деформации для запуска бейновского механизма, который обеспечивает наибольшую скорость превращения.

#### **4.4 Интерпретация с позиций динамической теории морфологического перехода от габитусов $\{557\}_\gamma$ к $\{225\}_\gamma$ при ГЦК-ОЦТ мартенситном превращении**

##### **4.4.1. Вводные замечания**

Задача интерпретации морфологического перехода от мартенситных кристаллов с габитусами  $\{557\}_\gamma$  к кристаллам с габитусами  $\{225\}_\gamma$  обладает достаточно продолжительной историей. Стоит напомнить [1], что и тот, и другой тип габитусов наблюдается при  $\gamma$ - $\alpha$  мартенситном превращении (МП) в сталях. При этом стандартное условие смены габитусов – изменение концентрации углерода: до 0.6 мас.%С можно наблюдать кристаллы пакетного мартенсита с габитусами вблизи  $\{557\}_\gamma$ , в то время как в интервале концентраций (0.6-1.4) мас.% С – не полностью двойникованные кристаллы мартенсита с габитусами вблизи  $\{225\}_\gamma$ . Помимо перемены состава обсуждаемый морфологический переход может оказаться индуцированным из-за возрастания скорости закалки [131]. Так как температура  $M_s$  в начале  $\gamma$ - $\alpha$  МП падает при повышении концентрации углерода, то при качественном термодинамическом пояснении такой переход можно связать со сменой механизмов релаксации напряжений, которые возникают при МП. На

самом деле, в пакетном мартенсите (с кристаллами в форме реек) можно часто наблюдать высокую плотность дислокаций внутри реечных кристаллов и сдвиговую релаксацию в остаточном аустените. Помимо этого, организация пакета кристаллов [128] задает высокий уровень аккомодации напряжений ансамблями реечных кристаллов. У кристаллов с габитусами  $\{225\}_\gamma$  типичным главным образом являются парные тупоугольные сочленения («баттерфляй» мартенсит), которые обладают сравнительно малым аккомодационным ресурсом. При симбиозе кристаллов с габитусами обоих типов [132] данный ресурс возрастает. Стоит заметить, что как раз при трактовке габитусов  $\{225\}_\gamma$  максимальные трудности испытывает кристаллогеометрический подход [54], цель которого заранее лимитирована описанием макроскопических морфологических признаков.

Напомним вкратце результаты динамической теории относительно интерпретации причин  $\{557\}_\gamma \rightarrow \{225\}_\gamma$  перехода и приведем новую количественную информацию, существенную при постановке прецизионных экспериментов.

#### 4.4.2. Трактовка концентрационной зависимости $\{557\}_\gamma \rightarrow \{225\}_\gamma$ перехода в динамической теории

В динамической теории (см., например, [99-102], а также п. 1.2) в первую очередь внимание обращается на процессы, обеспечивающие формирование отдельного кристалла, для получения как качественной, так и количественной информации. Как было показано в [133], переход  $\{557\}_\gamma \rightarrow \{225\}_\gamma$  мы можем связать с вариацией отношения скоростей квазипродольных управляющих волн  $\varkappa = v_2/v_1$ , волновые векторы которых отклоняются от осей симметрии второго и четвертого порядка. Равные по величине (но противоположные по знаку) углы  $\theta_c \approx \pm 7.9^\circ$  отклонений пар ортогональных волновых векторов управляющих волн в плоскости симметрии  $\{110\}_\gamma$  кубической решетки соответствуют равноправному



(критическому) описанию обоих типов габитусов. Кроме  $\theta_c$  будет задаваться критическое значение для отношений модулей скоростей пары управляющих волн при  $\varkappa_c \approx 1.31$ . В итоге, когда упругие модули сплава заданного состава являются такими, что будет выполнено условие  $\varkappa < \varkappa_c$ , то будет выгоднее реализация кристаллов с габитусами  $\{557\}_\gamma$ . Для обратного знака неравенства  $\varkappa > \varkappa_c$  будет более выгодной реализация кристаллов с габитусами  $\{225\}_\gamma$ . Исходя из этого, формулировался критерий морфологического перехода:

$$\varkappa < \varkappa_c \rightarrow \{557\}_\gamma, \varkappa > \varkappa_c \rightarrow \{225\}_\gamma. \quad (4.2)$$

Таким образом, появляется возможность объяснения смены габитусов ростом значений  $\varkappa$  при увеличении концентрации углерода.

#### **4.4.3. Трактовка $\{557\}_\gamma \rightarrow \{225\}_\gamma$ перехода при высоких скоростях закалки в динамической теории**

В противоположность мягкомодовым сценариям для переходов II рода, при реализации  $\gamma$ - $\alpha$  МП в сплавах железа существенны жесткие моды. Когда при приближении к точке перехода жесткость решетки увеличивается, то зарождение мартенсита происходит во все более сжатых условиях. В этом случае, несомненно, роль относительного изменения объема  $\delta$  для ярко выраженного перехода первого рода возрастет, и области с  $\delta \approx \delta_{\max} > 0$  будут иметь преимущество в качестве центров зарождения мартенсита по отношению к областям с  $\delta \approx 0$ . Исходя из анализа [36, 134] упругих полей ДЦЗ в форме петель с основными линиями  $[1\bar{1}0]_\gamma$ , подобные ДЦЗ могут запускать НВС для формирования кристаллов мартенсита с габитусами, по меньшей мере, двух ориентировок. Первая из них - "явная" будет характеризоваться нормалью, которая лежит в стереоугле с центральным лучом  $[557]_\gamma$ , тогда как вторая - "скрытая" характерна для решетки в условиях возросшей жесткости и описывается нормалью, в окрестности луча  $[225]_\gamma$ , которая отвечает условию локального максимума параметра  $\delta$  для упругого поля

ДЦЗ. Заметим, что такое объяснение не сводится к термодинамической трактовке [1], которая гласит, что при уменьшении температуры смена габитуса происходит из-за смены механизма релаксации напряжений (сдвиги в матрице - при высоких температурах, внутренние двойники превращения - при низких). У кристаллов с габитусами  $(225)_\gamma$  двойникование имеет частичный и необязательный характер, поскольку наодюдается двойникование, в основном, только центральной части квазипараллельной пары кристаллов.

Понятно, что если упругие модули имеют нормальную температурную зависимость (растут при понижении температуры), то продемонстрировать “скрытую” ориентировку возможно и в сталях с низкой концентрацией углерода, у которых при обычной закалке можно наблюдать единственный - “явный” вариант. Нужно только повысить скорость охлаждения до таких значений, которые достаточны для частичного снижения образования “явных” ориентировок. Вероятно, такая возможность и была реализована в экспериментах, в которых при скоростном охлаждении (до  $3 \cdot 10^5$  град/с) вместе с морфологией пакетного мартенсита (“явные” габитусы  $(557)_\gamma$ ) наблюдался пластинчатый мартенсит (“скрытые” габитусы  $(225)_\gamma$ ). Упомянем, что при скоростной закалке из высокотемпературного состояния проблема модификации упругого поля дислокации из-за упорядочения и неоднородного распределения примесей внедрения не актуальна, так как диффузия, вероятно, подавляется.

#### **4.4.4. Упругие поля ДЦЗ при краевой ориентацией вектора Бюргерса по отношению к сегменту $[1 \bar{1} 0]_\gamma$ дислокационной петли скольжения и выполнении условия $\alpha > \alpha_c$**

При расчете упругого поля ДЦЗ от нас требуется знание упругих модулей кристалла, которые неизвестны для монокристаллов систем FeC. Само собой, всегда можно использовать некоторые модельные наборы

значений. Так, требованию  $\varepsilon \approx \varepsilon_c$  примерно соответствует набор (в ТПа)  $C_{44}=0.112$ ,  $C_L=0.218$ ,  $C'=0.02$ , для которого, в отличие от экспериментальных данных для железо-никелевых сплавов [93], будет уменьшено значение  $C'$ , что в целом соответствует уменьшению модуля  $C_{11}$ . Ближайший по сути вариант изменения отношения модулей был описан в [134], кроме того, в [134] были рассмотрены смешанные ориентации вектора Бюргера по отношению к основным линиям  $[1\bar{1}0]_\gamma$  дислокационных петель. Здесь, однако, собственные векторы тензора деформаций упругого поля ДЦЗ, также как и волновые векторы волн в составе УВП, не будут лежать в плоскости симметрии  $\{110\}_\gamma$ . Поэтому было бы интересно для проверки согласования выводов, которые вытекают из анализа упругих полей ДЦЗ, провести расчеты для ориентации вектора Бюргера, которая обеспечивает попадание указанных векторов в плоскость симметрии.

Существование габитусов, обладающих парой одинаковых индексов Миллера, рассмотрим на примере ДЦЗ с линиями  $\Lambda \parallel \langle 1\bar{1}0 \rangle_\gamma$  и векторами Бюргера краевой ориентации  $\langle 11\bar{2} \rangle_\gamma$  относительно  $\Lambda$ . Возьмем ДЦЗ в форме прямоугольной петли, размеры которой (в единицах параметра решетки  $a$ )  $L_1 = 7 \cdot 10^4$  вдоль направления основных сегментов  $\Lambda_1 \parallel [1\bar{1}0]_\gamma$  и  $L_2 = 10^5$  вдоль  $\Lambda_2 \parallel [11\bar{2}]_\gamma$  при векторе Бюргера  $\mathbf{b} \parallel \Lambda_2$ . Понятно, что рассматривается петля скольжения, находящаяся в плоскости  $(111)_\gamma$ . Фиксация в пространстве цилиндрической системы отсчета по отношению к прямоугольной дислокационной петле, ориентации сторон которой задаются единичными векторами  $\mathbf{t}_1$  и  $\mathbf{t}_2$ , такая же, как и на рис. 3.1. Модуль радиус-вектора точки наблюдения  $R$  будет также задаваться в единицах  $a$ .

На рис. 4.5 показаны угловые зависимости для характеристик упругого поля ДЦЗ при значении  $R=2000$ , которые рассчитаны для модельного набора упругих модулей (в единицах ТПа):

$$C'=0.027, C_L=0.228, C_{44}=0.132. \quad (4.3)$$

В отличие от упоминаемого ранее модельного набора, который был использован в [134], набор (4.3) будет обеспечивать выполнение неравенства  $\varkappa > \varkappa_c$  в (4.2), главным образом, за счет увеличения упругого модуля  $C_{44}$ . Цифрами на графиках указываются значения для угловой переменной (в градусах). Значения собственных чисел  $\varepsilon_3$  тензора деформации поля ДЦЗ почти равны нулю, исходя из этого на графике кривая  $\varepsilon_3(\theta)$  не указывается. Так как для анализа важны только угловые локализации экстремумов главных деформаций растяжения и сжатия  $\varepsilon_{1,2}$  (а также соответствующие им ориентации собственных векторов), абсолютные значения  $\varepsilon_{1,2}$  мы не приводим, используя масштаб, который удобен для восприятия.

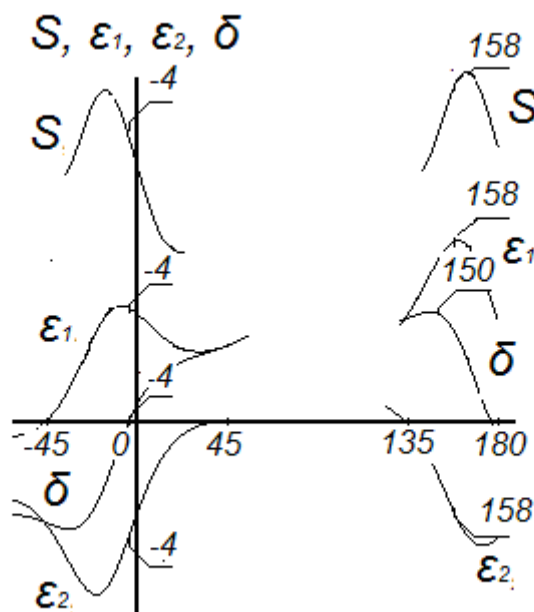


Рис. 4.5. Угловые зависимости модуля сдвига  $S$ , собственных чисел  $\varepsilon_{1,2}$  тензора деформаций и относительного изменения объема  $\delta$  упругого поля ДЦЗ для петли скольжения при  $R = 2000$  в актуальных областях углов  $\theta$ .

Для поставленной локальной задачи не нужен анализ всех особенностей угловых зависимостей, по этой причине на рис. 4.5 показаны только актуальные области углов, включающих два основных

максимальных значения модуля сдвига  $S$ . Цифровой метке 158 на рис. 4.5 сопоставляется значение угла  $\theta_1 \approx 158^\circ$ , соответствующее ориентации нормали  $N_{w1} \parallel \mathbf{n}_2 + \mathbf{n}_1 \varepsilon$ , близкой к  $[225]_\gamma$ , для ориентаций единичных волновых нормалей  $\mathbf{n}_1$  и  $\mathbf{n}_2$ , развернутых от осей  $[001]_\gamma$  и  $[110]_\gamma$  на угол  $\varphi \approx 4.8^\circ < \varphi_c$ . А именно:

$$\begin{aligned} N_{w1}(\theta_1) &\parallel [0.35283 \quad 0.35283 \quad 0.86661]_\gamma, \\ \mathbf{n}_1(\theta_1) &= [0.05878 \quad 0.05878 \quad -0.99654]_\gamma, \\ \mathbf{n}_2(\theta_1) &= [-0.70466 \quad -0.70466 \quad -0.08313]_\gamma \end{aligned} \quad (4.4)$$

Сравнение с (4.2) показывает, что при  $\varepsilon(\theta_1) \approx 1,44$  имеем  $\varepsilon > \varepsilon_c$ .

Цифровой метке – 4 на рис. 4.5 сопоставляется значение угла  $\theta_2 \approx -4^\circ$ , соответствующее ориентация нормали  $N_{w2} \parallel \mathbf{n}_2 - \mathbf{n}_1 \varepsilon$ , которая близка к  $[557]_\gamma$ , при ориентациях  $\mathbf{n}_1$  и  $\mathbf{n}_2$ , составляющих с осями  $[110]_\gamma$  и  $[001]_\gamma$  угол  $\varphi \approx 6.8^\circ$ , превосходящий величину отклонения для случая габитусов  $(225)_\gamma$ . Помимо этого, из рис. 4.5 следует, что углу  $\theta_2 \approx -4^\circ$  сопоставляется нулевое значение относительного изменения объема.

#### 4.4.5. Обсуждение результатов

Важно иметь в виду, что максимуму объемного эффекта (при  $\theta \approx 150^\circ$  на рис. 4.5) соответствует габитусная нормаль, также приближающаяся к  $[225]_\gamma$ , пусть и при больших отклонениях (на угол  $\varphi \approx 10.3^\circ$ ) волновых нормалей  $\mathbf{n}_1$  и  $\mathbf{n}_2$  от осей симметрии. Следовательно, при  $\varepsilon > \varepsilon_c$  оба упомянутых ранее критерия отбора габитуса  $(225)_\gamma$  в динамической теории находятся в согласии друг с другом, что увеличивает вероятность реализации кристаллов с габитусами  $(225)_\gamma$ .

Упомянем еще один факт. Определение критерия (4.2) в неявной форме предполагает сравнение эффективности инициации управляющим волновым процессом плоской деформации плоскостей  $\{110\}_\gamma$ , как говорилось в [41-43]. В то же время с этим процессом ассоциируется перенос пороговой деформации, иницирующей также и деформацию

Бейна. При качественном анализе морфологических признаков вполне приемлем вариант равенства в пороговом режиме параметров  $\alpha$  и  $k_w$ :

$$\alpha = v_2/v_1 \approx k_w \approx \left| \varepsilon_{1w} / \varepsilon_{2w} \right|^{1/2}, \quad (4.5)$$

где  $\varepsilon_{1w}$  и  $\varepsilon_{2w}$  деформации растяжения ( $\varepsilon_{1w} > 0$ ) и сжатия ( $\varepsilon_{2w} < 0$ ), соответственно, которые переносятся УВП. Такое приближение равносильно замене квазипродольных волн продольными. Современный этап развития динамической теории дает реальную возможность уточнения расчетов, что немаловажно при постановке экспериментов для прецизионного сравнения с последующими выводами теории. По этой причине целесообразно учитывать квазипродольный характер волн в составе УВП, находя вид тензора деформации  $\hat{\varepsilon}_w$ , сопоставляемого УВП. Впервые подобное сопоставление было выполнено в [80, 81]. Как продемонстрировано в п. 3.3, для пар ортогональных волновых нормалей в плоскости симметрии  $\{110\}_\gamma$  кубической решетки верным является соотношение:

$$k_w = (\alpha + \operatorname{tg} \psi) / (1 - \alpha \operatorname{tg} \psi), \quad (4.6)$$

в котором угол  $\psi$  будет соответствовать повороту собственных векторов  $\xi_{1w}$  и  $\xi_{2w}$  тензора деформации  $\hat{\varepsilon}_w$  по отношению к волновым нормалям. Ясно, что  $k_w > \alpha$  (при  $\psi > 0$ ),  $k_w = \alpha$  (при  $\psi = 0$ ) и  $k_w < \alpha$  (при  $\psi < 0$ ). Следовательно, отношениям скоростей в критерии (4.2) мы можем сопоставить отношения деформаций, которые рассчитаны не с помощью приближения  $k_w = \alpha$ , а на основе точной формулы (3.5). Само собой, для расчета  $\xi_{1w}$ ,  $\xi_{2w}$  и  $\psi$  нам потребуется знание упругих модулей конкретного сплава. При отсутствии этих данных можно использовать и модельные наборы упругих модулей. Большой интерес представляет сравнение отношений деформаций, реализуемых в пороговом режиме и на финальной стадии. Вероятность их совпадения впервые отмечена и обоснована при рассмотрении в [39-40] ОЦК-ГПУ превращения в титане. Помимо этого, при рассмотрении ДЦЗ значительную роль могут играть

вариации упругого поля, которые связаны с расчетом не только отдельных петель, но и их кристонных комплексов [126].

#### 4.5 Заключение к главе 4

Проведенные расчеты показывают, что интерпретация наблюдаемых морфологических признаков в динамической теории приводит к достаточно прозрачным физическим аргументам в пользу отбора кристаллов с габитусами  $\{hh\ell\}_\gamma$  при  $h > \ell$  для мартенсита охлаждения, возникшего после предварительной интенсивной пластической деформации. Оптимальные условия для формирования подобных кристаллов связаны с относительно узкими дислокационными петлями, имеющими основные сегменты вдоль плотноупакованных направлений  $\langle 110 \rangle_\gamma$  исходной  $\gamma$ -фазы. При этом критерий отбора носит комбинированный характер: наблюдаемые габитусы в основном ассоциируются с интервалом углов в упругом поле дислокационной петли, соответствующем близким к максимальному значению произведения величины сдвиговой деформации и относительного изменения объема.

Анализ, выполненный для упругих полей возможных дислокационных центров зарождения кристаллов бейнитного феррита с габитусами, близкими к  $(774)_\gamma$ , показывает, что один из сценариев формирования таких кристаллов может быть связан с реализацией в волновом режиме управления ростом кристалла с габитусной плоскостью, отвечающей условию деформации с инвариантной плоскостью. В то же время основные компоненты макропластины бейнитного феррита имеют габитусы вблизи  $(558)_\gamma$ , которые, в свою очередь, близки к габитусам  $(557)_\gamma$  пакетного мартенсита низкоуглеродистых сталей и удовлетворяют условию зарождения в упругих полях ДЦЗ, характеризуемых максимальными значениями деформаций растяжения, сжатия и сдвига.

Обсуждение причин морфологического перехода от кристаллов с габитусами  $\{557\}_\gamma$  к кристаллам с габитусами  $\{225\}_\gamma$  подтвердил конструктивность динамической теории формирования мартенситных кристаллов в выявлении критериев смены морфотипов на основе синтеза концепций неклассического варианта гетерогенного зарождения и волнового процесса управления ростом кристаллов, продемонстрировав комплексный характер влияния таких параметров как отношение скоростей пары управляющих волн и изменение удельного объема в области формирования начального возбужденного состояния.

Результаты, полученные в главе 4, опубликованы в [135-139].



## Заключение

Данная работа выполнена в русле динамической теории мартенситных превращений, базирующейся на новой парадигме для реконструктивных мартенситных превращений, протекающих с явно выраженными признаками фазовых переходов I рода. Важную роль при этом принадлежит концепции возбужденного состояния, из которого стартует рост мартенситного кристалла.

Упругие поля дефектов нарушают симметрию исходной фазы, снижают межфазные барьеры и создают благоприятные условия для возникновения начальных возбужденных состояний, как правило, колебательного типа. Подобное состояние инициирует волновой процесс, управляющий формированием кристаллов мартенсита. Одной из интересных проблем динамической теории является выяснение возможности наследования управляющим волновым процессом упругого поля дефекта в области старта роста кристалла мартенсита. В предшествующих работах преимущественно ограничивались вариантом приближения продольных волн, при котором механизм наследования сводился к коллинеарности волновых векторов волновых пучков в составе УВП с парой собственных векторов тензора упругой деформации ДЦЗ и простой связи между отношениями деформаций и скоростей волн. Во многих случаях этого приближения вполне достаточно для анализа наблюдаемых морфологических признаков и идентификации наиболее вероятных ДЦЗ. Однако, глубина степени наследования упругого поля ДЦЗ, как показано в данной работе, может быть существенно выше. Это открывает возможность прецизионного анализа, стимулируя и необходимость повышения точности экспериментальных данных. Существенным представляется и развитие теории формирования тонкой структуры двойников превращения, обладающей лишь тенденцией к регулярности. Именно на двух этих направлениях акцентировалось

внимание при постановке задач исследования автором и руководителем работы. Разумеется, в качестве базовой, при количественном анализе, использовалась обширная расчетная информация об упругих полях предполагаемых центров зарождения дислокационной природы.

В роли типичных ДЦЗ, в основном использовались дислокационные петли, а также, однократно, их суперпозиция, сопоставляемая кристоному носителю деформации сдвига в полосе сдвига с ориентацией границ (558) $\gamma$ , близкой к наблюдаемой ориентации границ основной речной компоненты макропластины бейнитного феррита (как и к габитусам пакетного мартенсита).

Приведем основные результаты, отраженные в главах 2-4 диссертации.

Для системы Fe-30Ni выполнена аналитическая интерполяция закона дисперсии фононов вдоль направления  $\Delta$  ( $\Gamma$ -X) в первой зоне Бриллюэна, согласующаяся с экспериментальными данными [92, 93] как в длинно - так и в коротковолновом диапазоне. Это позволяет находить значения фазовых и групповых скоростей s-волн во всем диапазоне волновых векторов, что особенно существенно для анализа формирования ДС в аустените с субмикроскопическим размером зерна.

Показано, что в реальном варианте отличие в разности скоростей s- и  $\ell$ -волн, характеризующее отклонение от условия формирования регулярной двойниковой структуры, является существенным и приводит к выводу о фрагментировании ДС. Причем каждый фрагмент ДС связывается со своей спонтанно активируемой s- $\ell$  ячейкой.

Показано, что, в зависимости от локализации спонтанно активируемой s- $\ell$  ячейки в области фронта управляющего волнового процесса, размеры фрагментов ДС, задаваемые числом  $N_{bas}$  основных компонент в ДС фрагмента, могут изменяться в широких пределах ( $N_{bas}$

определяется условием равенства ширин основной и двойниковой компонент ДС).

На основе требований совпадения тензоров деформации, сопоставляемых упругому полю центра зарождения в области локализации возбужденного состояния и управляющему волновому процессу, соответственно, предложен и успешно реализован (на примере мартенситных превращений в титане и сплаве Fe-31Ni) алгоритм отыскания УВП, наследующего тензор деформации упругого поля ДЦЗ.

Для мартенита охлаждения, наблюдаемого после предшествующей пластической деформации, ориентировка габитусных плоскостей  $(233)_\gamma$ , в рамках методологии динамической теории МП, проинтерпретирована как следствие образования ДЦЗ в форме прямоугольных петель с основными сегментами линий  $[01\bar{1}]_\gamma$  и векторами Бюргерса  $\mathbf{b} \parallel \langle \bar{3}11 \rangle_\gamma$ . При этом существенной является сравнительная узость петель и использование комбинированного фактора отбора ДЦЗ, учитывающего одновременно тенденции к экстремальности значений относительного изменения объема и сдвига.

Механизм образования кристаллов мартенсита охлаждения с габитусами  $(233)_\gamma$ , возникающими после предварительной интенсивной пластической деформации аустенита, связывается с наиболее быстрой трансформацией плоскостей  $\{110\}_\gamma$  аустенита, ведущей к материальным ориентационным соотношениям, близким к соотношениям Нишиямы.

Показано, что нетипичная для пакетного мартенсита ориентация габитусов дополнительной компоненты в макропластине бейнитного феррита, близкая к  $(774)_\gamma$ , соответствует инвариантной плоскости упругого поля ДЦЗ (в модели носителя сдвига по плоскостям  $(558)_\gamma$ ) с основными сегментами петель вдоль  $[1\bar{1}0]_\gamma$  и векторами Бюргерса  $\mathbf{b} \parallel [44-5]_\gamma$ .

Касаясь перспектив ближайших исследований, отметим два момента.

Следует продолжить описание теоретических сценариев формирования неоднородных структур двойников превращения, с учетом как детерминированных, так и стохастических факторов, для того, чтобы иметь возможность интерпретации любых особенностей реальных двойниковых структур.

В методическом отношении целесообразно программный блок, позволяющий восстанавливать характеристики УВП, наследующего в максимальной степени особенности упругих полей ДЦЗ, включить в разработанный ранее программный продукт для расчета и анализа упругих полей ДЦЗ.

Автор хотел бы поблагодарить всех коллег по работе, соавторов статей и особенно Веру Геннадиевну Чашину и Михаила Петровича Кащенко за конструктивную и эффективную помощь и сотрудничество на всех этапах работы.

**Список сокращений**

ГП	Габитусная плоскость
ГПУ	Гексагональная плотноупакованная (решетка)
ГЦК	Гранецентрированная кубическая (решетка)
ДЦЗ	Дислокационный центр зарождения
МК	Мартенситный кристалл
МО	Мартенсит охлаждения
МП	Мартенситное превращение
НВС	Начальное возбужденное состояние
ОС	Ориентационные соотношения
ОЦК	Объемно центрированная кубическая (решетка)
ОЦТ	Объемно центрированная тетрагональная (решетка)
УВП	Управляющий волновой процесс

**Список литературы**

1. Курдюмов, Г.В. Превращения в железе и стали / Г.В. Курдюмов, Л.М. Утевский, Р.И. Энтин. – М.: Наука, 1977. – 240 с.
2. Изюмов, Ю.А. Фазовые переходы и симметрия кристаллов / Ю.А. Изюмов, В.Н. Сыромятников. – М.: Наука, 1984. – 248 с.
3. Курдюмов, Г.В. Явления закалки и отпуска стали / Г.В. Курдюмов. – М.: Metallurgizdat, 1960. – 64с.
4. Бернштейн, М.Л. Термомеханическая обработка стали / М.Л. Бернштейн, В.А. Займовский, М.Л.Капуткина. – М.: Metallurgiya, 1983. – 480 с.
5. Кристиан, Д. Теория превращения в металлах и сплавах. Т.1 / Д. Кристиан. – М.: Мир, 1978. – 808 с.
6. Уманский, Я.С. Физика металлов / Я.С. Уманский, Ю.А.Скаков. – М.: Атомиздат, 1960. – 352 с.
7. Лысак, А.И. Физические основы термической обработки стали / А.И. Лысак, Б.И. Николин. – Киев: Техника, 1975. – 304 с.
8. Кривоглаз, М.А. Закалка стали в магнитном поле / М.А. Кривоглаз, В.Д. Садовский, Л.В. Смирнов и др. – М.: Наука, 1977. – 120 с.
9. Кауфман, Л. Термодинамика и кинетика мартенситных превращений / Л. Кауфман, М. Коэн. // Успехи физики металлов. – М.: Metallurgizdat, 1961. – Т.IV. – С. 192–298.
10. Ройтбурд, А.Л. Современное состояние теории мартенситных превращений / А.Л. Ройтбурд // Несовершенства кристаллического строения и мартенситные превращения. – М.: Наука, 1972. – С. 7–32.
11. Ройтбурд, А.Л. Мартенситные превращения / А.Л. Ройтбурд, Э.П. Эстрин // Итоги науки и техники. Metallovedenie i termicheskaya obrabotka. – М.: ВИНТИ, 1968. – С. 55; 1970. – С. 5–102.

12. Кащенко, М. П. Волновая модель роста мартенсита при  $\gamma$ - $\alpha$  превращении в сплавах на основе железа / М. П. Кащенко. – Екатеринбург: УИФ «Наука», 1993. – 224 с.
13. Bunshah, R.E. Rate of propagation of martensite / R.E. Bunshah, R.F. Mehl // Trans. AIME. – 1953. – V.197. – P. 1251–1258.
14. Mukerjee, K. On the dynamics of martensitic transformation / K. Mukerjee // Trans. AIME. – 1968. – V.242. – P. 1494–1501.
15. Robin, M. Etude par amplification electronique rapid de la propagation de la martensite dans un aliage ferrum-nicel / M. Robin, P.F. Gobin // Scripta Metall. – 1977. – V.11. – P. 669–674.
16. Robin, M. Electrical emission associated with the martensitic burst of Fe-Ni alloy / M. Robin, G. Lormand, P.F. Gobin // J.Phys. (Fr). – 1982. – V.43, №12 Suppl. – P. 485–490.
17. Локшин, Ф.Л. Скорость мартенситного превращения / Ф.Л. Локшин // Научные доклады высшей школы. – М.: Metallургия, 1958. – №2. – С. 205–208.
18. Локшин, Ф.Л. Динамическая теория мартенситного превращения / Ф.Л. Локшин // Тр. Новочеркас. политех. Института. – 1957. – Т.71/85. – 150с.
19. Takashima, K. The propagation velocity of the martensitic transformation in 304 stainless steel / K. Takashima, Y. Nigo, S. Nunomura // Phil. Mag. A. – 1984. – V.49, №2. – P. 231–241.
20. Мещеряков Ю.И., Кащенко М.П., Васильков В.Б., Атрошенко С.А. О сверхзвуковом распространении фронтов мартенситных превращений, инициированных ударными нагрузками // Письма в ЖТФ, Т.19, вып.2, 1993, С. 75–78.
21. Лихачев, В.А. Эффект памяти формы / В.А. Лихачев, С.Л. Кузьмин, З.П. Каменцева – Л.: Изд-во ЛГУ, 1987. – 216с.

22. Отсука, К. Сплавы с эффектом памяти формы / К. Отсука [и др.] / под ред. Фунакубо Х.:Пер. с японск. – М.: Металлургия, 1990. – 224с.
23. Пушин, В.Г. Предпереходные явления и мартенситные превращения / В.Г. Пушин, В.В., Кондратьев, В.Н. Хачин. – Екатеринбург.: Уро РАН, 1998. – 367с.
24. Сплавы никелида титана с памятью формы. Ч.1. Структура, фазовые превращения и свойства/ под ред. В.Г. Пушина. – Екатеринбург: Уро РАН, 2006. – 438с.
25. Кащенко, М.П. Колебательные аналоги деформации Бейна и морфология мартенсита в твердых растворах систем  $\gamma(\text{Fe-Ni})$  / М.П. Кащенко, Р.И. Минц // ФТТ. – 1977. – Т.19, вып.2. – С. 329–334.
26. Кащенко, М.П. Описание габитусных плоскостей ( $hh\ell$ ) в волновых моделях роста мартенсита для сплавов на основе меди, золота и железа / М.П. Кащенко // Известия высших учебных заведений. Физика. – 1982. – Т.25, №3. – С. 41–43.
27. Кащенко, М.П. Центры зарождения и волновые схемы роста мартенсита в сплавах железа / М.П. Кащенко, В.П. Верещагин // Известия высших учебных заведений. Физика. – 1989. – Т.32, №8. – С. 16–20.
28. Кащенко, М.П. Учет упругого поля прямолинейной дислокации в рамках волнового описания роста мартенсита / М.П. Кащенко, В.П. Верещагин // Известия высших учебных заведений. Физика. – 1989. – Т.32, №8. С. 20–23
29. Верещагин, В.П. Дислокационные центры зарождения  $\alpha$ -мартенсита и ориентационные соотношения при  $\gamma$ - $\alpha$  превращении в сплавах железа / В.П. Верещагин, М.П. Кащенко // ФТТ. – 1991. – Т.33, вып.5. – С. 1605–1607.



30. Верещагин, В.П. Дислокационные центры зарождения тонкопластинчатого  $\alpha$ -мартенсита в сплавах железа / В.П. Верещагин, С.М. Кащенко, М.П. Кащенко // Известия высших учебных заведений. Физика. – 1991. – Т.34, №9. – С. 79–83.
31. Коновалов, С.В. Центры зарождения и преимущественные ориентировки мартенситных кристаллов при специальной геометрии охлаждения монокристаллов аустенита / С.В. Коновалов, Т.Н. Яблонская, М.П. Кащенко // ЖТФ. – 1996. – Т.66, вып.11. – С. 177–181.
32. Кащенко, М.П. Дислокационные центры зарождения при обратном  $\alpha$ - $\gamma$  мартенситном превращении в сплавах железа / М.П. Кащенко, В.П. Верещагин, Н.В. Аристова // ФММ. – 1993. – Т.75, №2. – С. 38–43.
33. Кащенко, М.П. Дислокационные центры зарождения  $\alpha$ -мартенсита и парные сочленения кристаллов тонкопластинчатого мартенсита / М.П. Кащенко, С.В. Коновалов, Т.Н. Яблонская // Известия высших учебных заведений. Физика. – 1994. – Т.37, №6. – С. 64–67.
34. Кащенко, М.П. Дислокационные центры зарождения  $\alpha$ -мартенсита и парные сочленения кристаллов мартенсита с габитусами  $\{hh\ell\}$  / М.П. Кащенко, С.В. Коновалов, Т.Н. Яблонская // Известия высших учебных заведений. Физика. – 1994. – Т.37, №4. – С. 67–70.
35. Верещагин, В.П. Идентификация дефектов, необходимых для реализации многокристалльных группировок пакетного мартенсита / В.П. Верещагин, М.П. Кащенко, С.В. Коновалов, Т.Н. Яблонская // ФММ. – 1994. – Т.77, №4. – С. 173–174.
36. Кащенко, М.П. Модель формирования пакетного мартенсита / М.П. Кащенко, В.В. Летучев, С.В. Коновалов, Т.Н. Яблонская // ФММ. – 1997. – Т.83, №3. – С. 43–52.

37. Кащенко, М.П. Основные принципы динамической теории реконструктивных мартенситных превращений / М.П. Кащенко, В.Г. Чащина // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2006. – Т.3, №4. – С. 67–70.
38. Kashchenko, M.P. The material orientation relationship for the bcc-hcp transformation [Электронный ресурс] / M.P. Kashchenko, V.G. Chashchina // Режим доступа к журналу: <http://arxiv.org/abs/0707.1938v1>. – 13 Jul 2007.
39. Кащенко, М.П. Кристаллодинамика ОЦК-ГПУ мартенситного превращения. I. Управляющий волновой процесс / М.П. Кащенко, В.Г. Чащина // ФММ. – 2008. – Т.105, №6. – С. 571–577.
40. Кащенко, М.П. Кристаллодинамика ОЦК-ГПУ мартенситного превращения. II. Морфология мартенсита / М.П. Кащенко, В.Г. Чащина // ФММ. – 2008. – Т.106, №1. – С. 16–25.
41. Кащенко, М.П. Механизм ГЦК–ОЦК мартенситного превращения с наиболее быстрой перестройкой плотноупакованных плоскостей. I. Соотношение параметров решеток и габитусные плоскости / М.П. Кащенко, В.Г. Чащина // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2008. – Т.51, № 7. – С. 3–7.
42. Кащенко, М.П. Механизм ГЦК–ОЦК мартенситного превращения с наиболее быстрой перестройкой плотноупакованных плоскостей. II. Ориентационные соотношения / М.П. Кащенко, В.Г. Чащина // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2008. – Т.51, № 11. – С. 42–47.
43. Чащина, В.Г. Мартенситное превращение при наиболее быстрой перестройке  $\{110\}_\gamma$  плоскостей / В.Г. Чащина // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2009. – Т.52, № 7. – С. 95–98.

44. Алексина, И.В. Вероятные дислокационные центры зарождения мартенсита в системах Cu-Zn, Ti-Ni, Ti-Ni-Cu: дис. канд. физ.-мат. наук / И.В. Алексина. – Екатеринбург, 1997. – 146 с.
45. Аристова, Н.В. Роль фактора анизотропии в отборе центра зарождения мартенсита B19 в сплаве Ti-Ni-Cu / Н.В. Аристова, И.В. Алексина, М.П. Кащенко // ФММ. – 1994. – Т.77, №1. – С. 146–150.
46. Алексина И.В. Дислокационные центры зарождения и пирамидальная морфология мартенсита в Ti-Ni-Cu / И.В. Алексина, С.М. Кащенко, М.П. Кащенко // Функционально – механические свойства материалов и их компьютерное конструирование / под редакцией В.А. Лихачева // Материалы XXIX Межреспубликанского семинара «Актуальные проблемы прочности» 15-18 июня 1993г. – Псков, 1993. – С. 545–548.
47. Alexina, I.V. The dislocation nucleation centres at B2-B19 martensitic transformation in Ti-Ni-Cu alloy / I.V. Alexina, N.V. Aristova, V.V. Letuchev, M.P. Kashchenko // Shape memory International academic publishers. – Beijing, China, 1994. – P. 65–69.
48. Кащенко, М.П. Дислокационные центры зарождения при B2-B19 мартенситном превращении в никелиде титана / М.П. Кащенко, И.В. Алексина, В.В. Летучев, А.В. Нефедов // ФММ. – 1995. – Т.80, №6. – С. 10–15.
49. Letuchev, V.V. Conception of New Phase Dislocation-Based Nucleation at Reconstructive Martensitic Transformations / V.V. Letuchev, V.P. Vereshchagin, I.V. Alexina, M.P. Kashchenko // Journal de Physique IV, Colloque C8. – 1995. – Vol.5.
50. Кащенко М.П. Динамическая модель формирования промежуточного мезоскопического состояния при B2→B19- мартенситном превращении / М.П. Кащенко, В.Г. Чащина // Изв. вузов. Физика. – 2013. – Т.56. №5. – С. 65–68.

51. Кащенко М.П. Динамическая модель  $B2 \rightarrow B19$ -мартенситного превращения с учетом промежуточного мезоскопического состояния / М.П. Кащенко, В.Г. Чащина // Изв. вузов. Физика. – 2013. – Т.56. – №6. – С. 39–43.
52. Кащенко М. П. Динамическая модель  $B2 \rightarrow B19 \rightarrow B19'$  мартенситного превращения / М.П. Кащенко, В.Г. Чащина // МиТОМ. 2013. – №12. – С. 7–10.
53. Кащенко М.П. Описание морфологических признаков при  $B2$ - $B19'$  мартенситном превращении в русле концепции управляющего волнового процесса / М.П. Кащенко, В.Г. Чащина // Физическая мезомеханика. 2014. – Т.17. – №4. – С. 69–76.
54. Wechsler M.S. On the theory of the formation of martensite / M.S. Wechsler, D.S. Lieberman, T.A. Read // Journal of Metals. – 1953, november. – P. 1503–1515.
55. Bowles J.S. The crystallography of martensite transformations I / J.S. Bowles, J.K. Mackenzie // Acta Metallurgica. – 1954. – Vol. 2, № 1. – P. 129–137.
56. Bowles J.S. The crystallography of martensite transformations II / J.S. Bowles, J.K. Mackenzie // Acta Metallurgica. – 1954. – Vol.2, № 1. – P. 138–147.
57. Bowles J.S. The crystallography of martensite transformations III. Face-centered cubic to body-centered tetragonal transformations / J.S. Bowles, J.K. Mackenzie // Acta Metallurgica. – 1954. – Vol. 2, № 3. – P. 224–234.
58. Криземент О. К термодинамике аустенитно-мартенситного превращения / О. Криземент, З. Гудремон, Ф. Вефер // В кн. «Фазовые превращения в стали». – М.: Металлургиздат – 1961. – С. 72–89.

59. Могутнов Б.М., Термодинамика железо-углеродистых сплавов / Б.М. Могутнов, И.А.Томилин, Л.А.Шварцман. – М.: Металлургия, 1972. – С. 263–271.
60. Ройтбурд А.Л. Теория формирования гетерофазной структуры при фазовых превращениях в твердом состоянии / А.Л. Ройтбурд // УФН. – 1974. – Т.113, №1. – С. 69–104.
61. Паташинский А.З. Флуктуационная теория фазовых переходов / А.З. Паташинский, В.Л. Покровский. – М.: Наука, 1982. – 382с.
62. Falk F. Ginzburg-Landau theory of static domain walls in shape-memory alloys / F. Falk // Z. Phys. B. Condensed Matter. – 1984. – V.54. – P. 177.
63. Falk F. Landau theory and solitary waves in shape – memory alloys / F. Falk // Z. Phys. B. Condensed Matter. – 1984. – V.54. – P. 159– 167.
64. Barsch G.R. Dynamical of twin boundaries in martensites / G.R. Barsch, B. Horovitz, J.A. Krumhansl // Phys. Rev. Letters. – 1987. – V. 59, № 11. – P. 1251–1254.
65. Bales G.S. Interfacial dynamics at a first-order phase transition involving strain: dynamical twin formation / G.S. Bales, R.J. Gooding // Phys. Rev. Letters. – 1991. – V. 67. № 24. – P. 3412-3415.
66. Saxena A. model of shape memory materials with hierarchical twinning: statics and dynamics / A. Saxena [et al.] // J.Phys. (Fr). – 1995. –V.5, № 12 – P.125 –130.
67. Rasmussen K.O. Three-dimentional elastic compatibility: twinning in martensites [Электронный ресурс]. / К.О. Rasmussen [et al.] – Режим доступа к журналу: arXiv: cond-mat/0001410v1 – 28 Jan 2000.
68. Reid A. C. E. Hydrodynamic description of elastic solids with open boundary conditions undergoing a phase transition / A. C. E. Reid, R. J. Gooding // Phys. Rev. B. – 1994. – V. 50, № 6. – P.3558-3602.

69. Rao M., Sengupta S. Droplet fluctuations in the morphology and kinetics of martensites / M. Rao // *Phys. Rev. Letters.* – 1997. – V. 78, № 11. – P. 2168-2171.
70. Theil F. A study of a hamiltonian model for martensitic phase transformations including microkinetic energy [Электронный ресурс] / F. Theil, V.I. Levitas // Режим доступа к журналу: arXiv: pattsol/9811006 v1 [cond-mat. mtrl-sci]. – 19 Nov 1998.
71. Fischer F.D. Mechanics and phase transformation / F.D. Fischer // *Proceedings of EUROMAT 2000.* – Amsterdam: Elsevier science Ltd. – VI: Advances in mechanical behaviour, plasticity and damage – 2000. – P. 41–52.
72. Meyer R. Molecular dynamics Study of Iron-Nickel Alloys /A. Planes, J. Ortín and L1 Mañosa Eds / R. Meyer, P. Entel // *IV European Simposium on martensitic transformations.* – Barselona, 1994. – P. 123–128.
73. Meyer R. Lattice Dynamics of Martensitic Transformations Examined by Atomistic Simulations [электронный ресурс] / R. Meyer, P. Entel // Режим доступа к журналу: arXiv: cond-mat/ 9706248v1. – 24 June. 1997.
74. Карькина Л.Е. Структурные превращения в нанокластерах сплава Fe-Ni. Результаты моделирования методом молекулярной динамики / Л.Е. Карькина, И.Н. Карькин, Ю.Н. Горностырев // *ФММ.* – 2006. – Т. 101, вып. 2. – С. 146–157.
75. Кащенко М.П. Динамическая модель формирования двойниковой структуры мартенсита / М.П. Кащенко, С.В. Иванов, В.Г. Чащина // *Эволюция дефектных структур в конденсированных средах: тезисы докладов.* – Барнаул: АГТУ, 1998. – С. 26–27.
76. Кащенко М.П. Динамический механизм двойникования мартенситного кристалла / М.П. Кащенко, В.Г. Чащина // *XXXV*

- семинар «Актуальные проблемы прочности». Механизмы деформации и разрушения перспективных материалов: сборник трудов. – Псков: ППИ СПбГТУ, 1999. – С. 14–19.
77. Kashchenko, M.P. The description of twinning in the wave model of martensite growth / M.P. Kashchenko, S.V. Ivanov, A.V. Nefedov, V.V. Letuchev, V.G. // ICSSPT (PTM'99) Japan Final Program and Abstracts. JIMIC – 3. – Kyoto, 1999. – P. 206.
78. Чащина, В.Г. Динамические модели формирования двойников превращения и полос неоктаэдрического сдвига: дис. канд. физ.-мат. наук / В.Г. Чащина. – Екатеринбург, 2000. – 139 с.
79. Кащенко, М.П. Динамические модели формирования двойникованных кристаллов при мартенситных превращениях / М.П. Кащенко [и др.] // XVII Петербургские чтения по проблемам прочности. 10-12 апреля 2007г.: сборник материалов. – СПб, 2007. – Ч.II. – С. 278–280.
80. Кащенко, М.П. Динамическая модель формирования двойникованных мартенситных кристаллов при  $\gamma$ - $\alpha$  превращении в сплавах железа / М.П. Кащенко, В.Г. Чащина. – Екатеринбург: Урал. гос. лесотехн. ун-т., 2009. – 98с.
81. Kashchenko M. Dynamic theory of  $\gamma$ - $\alpha$  martensitic transformation in iron-based alloys. Solving the problem of the formation of twinned martensite crystals / M. Kashchenko, V. Chashchina – Saarbrucken, Germany: LAMBERT Academic Publishing. – 2012. – 120p.
82. Кащенко, М.П. Кристаллодинамическая модель отбора ориентации границ двойниковой структуры при формировании мартенситного кристалла / М.П. Кащенко, В.Г. Чащина, С.В. Вихарев // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2009. – Т.52, №8, – С. 94–95.
83. Кащенко, М.П. Соотношение компонентов слоистой структуры, формируемой управляющим волновым процессом в метастабильно

- устойчивом аустените / М.П. Кащенко, В.Г. Чащина, С.В. Вихарев // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2009. – Т.52, №9. – С. 96–97.
84. Кащенко М.П. Динамические модели формирования двойникованных кристаллов. I. Управляющий волновой процесс и снятие вырождения по ориентации двойниковых границ. при мартенситных превращениях / М.П. Кащенко, В.Г. Чащина, С.В. Вихарев // ФММ. – 2010. – Т. 110. – вып. 3. – С. 212–222.
85. Кащенко М.П. Динамические модели формирования двойникованных кристаллов. II. Предпереходные состояния и соотношения объемов двойниковых компонент / М.П. Кащенко, В.Г. Чащина, С.В. Вихарев // ФММ. – 2010. – Т. 110. – вып. 4. – С. 323–335.
86. Чащина, В.Г. Развитие динамических моделей управления ростом кристаллов при реконструктивных мартенситных превращениях: дис. ... докт. физ.-мат. наук / В.Г. Чащина. – Екатеринбург, 2011. – 382с.
87. Федоров, Ф.И. Теория упругих волн в кристаллах / Ф.И. Федоров. – М.: Наука, 1965. – 388с.
88. Счастливец В.М. Мартенситное превращение в магнитном поле / В.М. Счастливец, Ю.В. Калетина, Е.А. Фокина. – Екатеринбург: УрО РАН, 2007. – 322с.
89. Maki T. Transformation Twin Width Variation in Fe-Ni and Fe-Ni-C Martensites / T. Maki, C.M. Wayman // Proc.1<sup>st</sup> JIM Int. Symp. On New Aspects of Martensitic Transformation. Suppl. Trans. JIM. – 1976. – Vol.17. – P.69–74.
90. Кащенко М.П. Ключевая роль двойников превращения при сравнении результатов кристаллогеометрического и динамического анализа для тонкопластинчатого мартенсита / М.П. Кащенко, В.Г. Чащина // ФММ, 2013. – Т. 114. № 10. – С. 894–898.



91. Исаев Э.И. Фононные спектры L12 Ni<sub>3</sub>Al B2 NiAl: расчеты из первых принципов / Э.И. Исаев, А.И. Лихтенштейн, Ю.Х. Векилов, Е.А. Смирнова // ФТТ. 2003. – Т. 46. № 7. – С. 1158–1164.
92. Hallman E.D. Crystal dynamics of nickel–iron and copper–zinc alloys / E.D. Hallman, B.N. Brockhouse // Canadian Journal of Physics, 1969, – 47(10):
93. Haush, G. Single crystalline elastic constants of ferromagnetic centered cubic Fe-Ni invar alloys / G. Haush, H. Warlimont // Acta Metallurgica. – 1973. – V.21, №4. – P. 400–414.
94. Кащенко М.П. Аналитическая аппроксимация законов дисперсии фононов вдоль осей  $\langle 001 \rangle_\gamma$  ГЦК решетки / М.П. Кащенко, И.Ф. Латыпов, В.Г. Чащина // Тезисы докладов 54 Международной конференции «Актуальные проблемы прочности». 11–15 ноября 2013 года – 2013. – Екатеринбург. – ИФМ УрО РАН. – С. 12–13.
95. Кащенко М.П. Возможность реализации условия формирования регулярной структуры двойников превращения в динамической теории мартенситных превращений / М.П. Кащенко, И.Ф. Латыпов, В.Г. Чащина // Доклады международной конференции «Сплавы с эффектом памяти формы: свойства, технологии, перспективы». 26 – 30 мая 2014 г. Витебск. – Беларусь. ОУ «ВГТУ». – 206 с.
96. Кащенко М.П. Модуляция соотношения компонент двойников превращения, обусловленная реальным соотношением скоростей волн в составе управляющего волнового процесса / М.П. Кащенко, И.Ф. Латыпов, В.Г. Чащина // Актуальные проблемы физического металловедения сталей и сплавов: (Тольятти, 2 - 6 февраля 2016 г.) – 270 с.
97. Кащенко М.П. Влияние соотношения скоростей волн, управляющих формированием тонкопластинчатого двойникового мартенсита, на модуляцию двойниковой структуры процесса / М.П. Кащенко,

- И.Ф. Латыпов, В.Г. Чащина // Вестник Тамбовского университета. Серия: Естественные и технические науки. 2016. – Т.21, №3 – С.1046–1050.
98. Kashchenko M.P. Correlation of velocities of the waves controlling the thin-plate  $\alpha$ -martensite formation and the modulation of the transformation twin structure / M.P. Kashchenko, I.F. Latypov, V.G. Chashchina // Letters on materials. – 2017. – № 7(2) – P. 146–150.
99. Кащенко М.П. Динамическая модель сверхзвукового роста мартенситных кристаллов / М.П. Кащенко, В.Г. Чащина // УФН. 2011. – Т. 181. – № 4. – С. 345–364.
100. Кащенко М.П. Формирование мартенситных кристаллов в предельном случае сверхзвуковой скорости роста / М.П. Кащенко, В.Г. Чащина // Письма о материалах. 2011. – Т.1. – С. 7–15.
101. Kashchenko M.P., Chashchina V.G. Fundamental achievements of the dynamic theory of reconstructive martensitic transformations / M.P. Kashchenko, V.G. Chashchina // Materials Science Forum. 2013. – V. 738-739. – P. 3–9.
102. Кащенко М. П. Волновая модель роста мартенсита при  $\gamma$ - $\alpha$  превращении в сплавах на основе железа. Изд. 2-е. испр. и дополн. / М.П. Кащенко – М. – Ижевск: НИЦ “Регулярная и хаотическая динамика”, Ижевский институт компьютерных исследований, – 2010. – 280 с.
103. Кащенко М.П. Динамическая модель  $\gamma$ - $\alpha$  мартенситного превращения в сплавах железа и решение проблемы критического размера зерна / М.П. Кащенко, В.Г. Чащина. – М. –Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», Ижевский институт компьютерных исследований, 2010. – 133 с.

104. Кащенко М.П., Чащина В.Г. Тензор деформации, связанный с управляющим волновым процессом при деформации плоскостей  $\{110\}_c$  кубических кристаллов в ходе мартенситных превращений / М.П. Кащенко, В.Г. Чащина. // Известия вузов. Физика. 2014. – Т.57. – №8. – С.84–89
105. Кащенко, М.П. Кристаллодинамика образования  $\varepsilon$ -мартенсита с габитусами  $\{334\}_\alpha$  в титане / М.П. Кащенко, К.Н. Джемилев, В.Г. Чащина // Известия высших учебных заведений. Физика. 012. – Т.55. – №9. – С. 67–70
106. Хачин В.Н. Особые упругие свойства В2-соединений титана с нестабильной решеткой. / В.Н. Хачин, С.А. Муслов, В.Г. Пушин, В.В. Кондратьев // Металлофизика. 1988. – Т.10. N1. – С. 102–104.
107. Mercier O. Single-crystal elastic constants of the equiatomic NiTi alloy near the martensitic transformation / O. Mercier, K.N. Melton, G. Gremand, J. Hagi // J. Appl. Phys. – 1980. – V.51, № 3. – P. 1833–1834.
108. Sabury T. Morphological characteristics of the orthorhombic martensite in a shape memory Ti-Ni-Cu alloy / T. Sabury, J. Watanabe, S. Nenno // ISIJ International. – 1989. – V. 29. – № 5. – P. 405–411.
109. Кащенко М.П. Возможность волнового управления формированием двойникового аустенита в процессе образования бейнитного феррита / М.П. Кащенко, В.Г. Чащина. / ФММ, 2015 – 116 (4) – С. 339–346.
110. Кащенко М.П. Волновой механизм роста и новая методика инициирования зарождения  $\alpha$ -мартенсита. / М.П. Кащенко, В.В. Летучев, С.В. Коновалов, С.В. Нескоромный // ФММ, 1993 – Т.76 – № 3 – С. 90–101.
111. Джемилев К.Н. Расчеты упругих полей дислокационных петель и кристонов с целью идентификации центров зарождения мартенсита :

- автореф. дис. ... к-та физ.-мат. наук / К.Н. Джемилев. – Екатеринбург, 2006. – 24с.
112. Теодосиу, К. Упругие модели дефектов в кристаллах / К. Теодосиу. – М.: Мир, 1985. – 352с.
113. Кащенко М.П. Возможности наследования волновым механизмом управления ростом кристалла мартенсита характеристик упругого дислокационного центра зарождения / М.П. Кащенко, И.Ф. Латыпов, В.Г. Чащина // Актуальные проблемы физического металловедения сталей и сплавов: материалы XXII Уральской школы материаловедов – термистов. – Орск: ОГУ, 2014. – 245с.
114. Кащенко М.П. Динамика наследования мартенситными кристаллами характеристик упругого поля в областях зарождения / М.П. Кащенко, И.Ф. Латыпов, В.Г. Чащина // Фазовые превращения и прочность кристаллов: сб. тезисов VIII Международной конференции (27-31 октября 2014, Черногоровка), – Черногоровка, 2014 – 226с. (С.161)
115. Кащенко М.П. Наследование упругого поля дислокационного центра зарождения управляющим волновым процессом / М.П. Кащенко, И.Ф. Латыпов, В.Г. Чащина // Известия вузов. Физика. 2015. Т. 58, № 1. С.72–76.
116. Кащенко М.П. Наследование тензора деформации управляющим волновым процессом в области зарождения мартенсита на примере Fe-Ni сплавов / М.П. Кащенко, И.Ф. Латыпов, В.Г. Чащина // Известия вузов. Физика. 2016, Т.59, №5. С.128–129.
117. Билби, Б.А. Мартенситные превращения / Б.А. Билби, И.В. Христиан // УФН. – 1960. – Т.70, №3. – С. 515–564.
118. Bhadeshia, H.K.D.H. Bainite in steels / H.K.D.H. Bhadeshia. – 2nd ed. – London: University Press. Cambridge, 2001. – 454p.

119. Sandvik, B.P.J. The bainite reaction in Fe-Si-C Alloys: The primary stage / B.P.J. Sandvik // Metall. Trans. A. – 1982. – V.13. – P. 777–787.
120. Варлимонт Х., Дилей Л. Мартенситные превращения в сплавах на основе меди, серебра и золота / Х. Варлимонт, Л. Дилей – Пер. с англ. – М.: Наука, 1980. – 206с.
121. Televich, R.V. Crystallogeometry of the iron-nikel martensite formation in the deformed  $\gamma$ -phase / R.V. Televich, E.V. Pereloma, S.Z. Gornjak // Всесоюзная конференция по мартенситным превращениям в твердом теле: сборник докладов. – Киев: Ин-т металлофизики АН Украины, 1992. – С. 90–93.
122. Вовк Я.Н. Ориентировка кристаллической решетки мартенсита, образовавшегося из предварительно деформированного аустенита / Я.Н. Вовк, С.П. Ошкадеров // ФММ. – 1990. – Т. 70. – № 3. – С. 150–155.
123. Кащенко М.П. Связь различных габитусов с вариантами ориентационных соотношений при  $\gamma$ - $\alpha$  мартенситном превращении в динамической теории / М.П. Кащенко, К.Н. Джемилев, В.Г. Чащина // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2012. – Т.9 – №1. – С. 50–56
124. Кащенко, М.П. Упругие поля кристонов при формировании речной структуры бейнитного феррита / М.П. Кащенко, К.Н. Джемилев, В.Г. Чащина // Наука и образование. МГТУ им. Н.Э. Баумана [Электронный ресурс]. – 2013. – №1. – Режим доступа к журналу: <http://technomag.edu.ru/en/doc/529309.html>. – DOI: 10.7463/0113.0529309.
125. Кащенко М.П.. Вероятностные дислокационные центры зарождения кристаллов  $\alpha$  – мартенсита охлаждения с габитусами  $\{233\}_\gamma$  после предварительной пластической деформации / М.П. Кащенко, И.Ф. Латыпов, В.Г. Чащина // Международная конференция «Актуальные

проблемы физического металловедения металлов и сплавов»XXI Уральская школа металловедов – термистов. Тезисы докладов. – Магнитогорск 2012. – С.106

126. Kashchenko M.P. Crystons:basic ideas and application / M.P. Kashchenko, V.G. Chashchina // Letters on materials. – 2015. – V.5. №1. – P.82–89.
- 127.Блантер М.Е. Фазовые превращения при термической обработке стали / М.Е. Блантер – М.: Metallurgizdat, 1962. – 270с.
- 128.Счастливец, В.М. Стальные монокристаллы / В.М. Счастливец, Д.А. Родионов. – Екатеринбург: УрО РАН, 1996. – 275с.
- 129.Кащенко М.П. Оценка эффективной скорости роста пластины бейнитного феррита в динамической теории / М.П. Кащенко, В.Г. Чащина // ФММ. 2013. – Т. 114, №3. – С. 290 – 296.
- 130.Кащенко М.П. Возможные сценарии формирования бимодального состава субреек в макропластине бейнитного феррита в динамической теории / М.П. Кащенко, К.Н. Джемилев, В.Г. Чащина // **Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2012. – Т. 9. № 1. – С. 452–458.**
- 131.Мирзаев Д.А. Влияние скорости охлаждения на положение мартенситных точек. Углеродистые стали / Д.А. Мирзаев, М.М. Штейнберг, Т.Н. Пономарева, В.М. Счастливец // ФММ. 1979. – т.47, вып. 1. – С. 125–135.
- 132.Изотов В.И. Структура закаленной конструкционной стали. Состояние перегрева / В.И. Изотов // ФММ. 1975. – т.39. вып. 4. – С. 801–814.
- 133.Кащенко М.П. Описание габитусных плоскостей в волновых моделях роста мартенсита. Габитусы (225), (557), (925) / М.П. Кащенко // Изв. вузов, Физика. 1982. – № 2, С. 7–9.

134. Кащенко, М.П. Зарождение кристаллов  $\alpha$  – мартенсита с габитусами  $(hh\ell)$  в упругих полях дислокационных петель / М.П. Кащенко, А.В. Нефедов, В.П. Верещагин, В.В. Летучев // ФММ. – 1998. – Т.85, №4. – С. 25–39.
135. Кащенко М.П. Вероятностные дислокационные центры зарождения кристаллов  $\alpha$  – мартенсита охлаждения с габитусами  $\{233\}_\gamma$  после предварительной пластической деформации / М.П. Кащенко, И.Ф. Латыпов, В.Г. Чащина // Международная конференция «Актуальные проблемы физического металловедения металлов и сплавов» XXI Уральская школа металловедов – термистов. Тезисы докладов. – Магнитогорск 2012. – С.106
136. Кащенко М.П. Формирование дополнительной речной компоненты бейнитного феррита / М.П. Кащенко, К.Н. Джемилев, И.Ф. Латыпов, В.Г. Чащина // Вестник Тамбовского университета. Серия: Естественные и технические науки. – 2013. . – Т. 18. . – № 4-2. . – С. 1605–1606.
137. Кащенко М.П. Интерпретация с позиций динамической теории морфологического перехода от габитусов  $\{557\}$  к  $\{225\}$  при ГЦК-ОЦТ мартенситном превращении / М.П. Кащенко, И.Ф. Латыпов, А.В. Нефедов, А.Г. Семеновых, В.Г. Чащина // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2014. – Т. 11. №1. – С. 110–113
138. Кащенко М.П. Правила отбора дислокационных центров зарождения мартенсита в динамической теории реконструктивных мартенситных превращений / М.П. Кащенко, И.Ф. Латыпов, А.В. Нефедов, А.Г. Семеновых, В.Г. Чащина // Письма о материалах. 2014. – Т. 4, № 1. С. 15–17.
139. Кащенко М.П. Дислокационные центры, инициирующие формирование кристаллов мартенсита охлаждения с габитусами  $\{233\}$  и  $\{31010\}$  / М.П. Кащенко, И.Ф. Латыпов, А.Ф. Рыбалко, Н.М. Рыбалко, В.Г. Чащина // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2016. – Т. 13. – №3. – с. 110 – 113.

## Приложение А

### Алгоритм восстановления волновых нормалей управляющих волн

```

function [ n1, n2, n3 ] = FindN3( input_args )
%UNTITLED3 Summary of this function goes here
% Detailed explanation goes here

%% Введение данных для расчета n3

format long;

xi1 = [-0.825991 -0.563009 -0.0275563];
xi2 = [0.133412 -0.147764 -0.979983];
xi3 = [0.547667 -0.813134 0.197164];
N = [-0.511653 -0.511927 -0.690030];
k = 1.0676915;
turn = zeros(3);
xi3f = double([0 0 0]);
xi2f = double([0 0 0]);
xi1f = double([0 0 0]);

%% Перебор значений угла f

stop = 0;
f = double(0); %начальный угол поворота
df = double(pi/360); %начальный шаг поворота
dk = double(k/10000); %дельта-k
n = int8(0); %счетчик итераций
nmax = 100000; %максимальное количество итераций
cclock=int8(0); %сколько раз включалась обратная перемотка
while stop == 0

    if n==0 %если это первый шаг
        turn = [(cos(f)+(1-cos(f))*N(1)^2) ((1-cos(f))*N(1)*N(2)-
sin(f)*N(3)) ((1-cos(f))*N(1)*N(3)+sin(f)*N(2)) %матрица
поворота вокруг N на угол f

```



```

        ((1-cos(f))*N(1)*N(2)+sin(f)*N(3)) (cos(f)+(1-
cos(f))*N(2)^2) ((1-cos(f))*N(2)*N(3)-sin(f)*N(1))
        ((1-cos(f))*N(3)*N(1)-sin(f)*N(2)) ((1-
cos(f))*N(3)*N(2)+sin(f)*N(1)) (cos(f)+(1-cos(f))*N(3)^2)];
        xi3f = xi3*turn; %поворачиваем xi3 на угол f
        k2 =
abs((xi3f(1)*xi2(1)+xi3f(2)*xi2(2)+xi3f(3)*xi2(3))/(xi3f(1)*xi
1(1)+xi3f(2)*xi1(2)+xi3f(3)*xi1(3))); %считаем k2 по модулю
        f=f+df; %изменяем угол на шаг df
        n=n+1; %увеличиваем значение счетчика итераций на 1
    end

        turn = [(cos(f)+(1-cos(f))*N(1)^2) ((1-cos(f))*N(1)*N(2)-
sin(f)*N(3)) ((1-cos(f))*N(1)*N(3)+sin(f)*N(2)) %матрица
поворота вокруг N на угол f
        ((1-cos(f))*N(1)*N(2)+sin(f)*N(3)) (cos(f)+(1-
cos(f))*N(2)^2) ((1-cos(f))*N(2)*N(3)-sin(f)*N(1))
        ((1-cos(f))*N(3)*N(1)-sin(f)*N(2))
((1-cos(f))*N(3)*N(2)+sin(f)*N(1)) (cos(f)+(1-
cos(f))*N(3)^2)];

        xi1f = xi1*turn; %поворачиваем xi1 на угол f
        xi2f = xi2*turn; %поворачиваем xi2 на угол f
        xi3f = xi3*turn; %поворачиваем xi3 на угол f
        k1 =
abs((xi3f(1)*xi2(1)+xi3f(2)*xi2(2)+xi3f(3)*xi2(3))/(xi3f(1)*xi
1(1)+xi3f(2)*xi1(2)+xi3f(3)*xi1(3))); %считаем k1 по модулю

        if or( and(k1>=k-dk, k1<=k+dk), n>nmax) %если текущее
значение k1 попало в интервал k+-dk или количество итераций
больше nmax
            n3=xi3f;
            stop = 1; %остановка цикла while
            n=n+1;

```

```

elseif or( and(k1<k-dk, k2<k-dk), and(k1>k+dk, k2>k+dk) )
%если текущее и предыдущее значение k по одну сторону от k+-dk
    %df=df; шаг остается тот же
    f=f+df; %изменяем угол на шаг df
    k2=k1; %сохраняем текущее значение k1 как k2
    n=n+1; %увеличиваем значение счетчика итераций на 1

elseif or( and(k2<k-dk, k1>k+dk), and(k2>k+dk, k1<k-dk) )
%если перескочили интервал k+-dk,
    df=-df/2; %меняем знак шага поворота и делим шаг
пополам
    f=f+df; %изменяем угол на шаг df
    k2=k1; %сохраняем текущее значение k1 как k2
    n=n+1; %увеличиваем значение счетчика итераций на 1
    cclock=cclock+1; %увеличиваем значение счетчика
обратной перемотки на 1
end

end

%
%% Введение данных для расчета карра
%

C44 = 0.034;
C1 = 0.186;
Ca = 0.013;

C11 = Ca+C1-C44;
C12 = C1-Ca-C44;

C1 = C44/C11;
C2 = (C12+C44)/C11;
C3 = (C11-C12-2*C44)/C11;

DM = [1 0 0

```

```

0 1 0
0 0 1];

Polar1 = [0 0 0];
Polar2 = [0 0 0];

%% Расчет катта

stop2 = 0;
w = double(0); %начальный угол поворота
dw = double(pi/10000); %начальный шаг поворота
dkappa = 0.0001; %дельта-катта
t = int16(0); %счетчик итераций
tmax = 25000; %максимальное количество итераций
cclock1=int16(0); %сколько раз включалась обратная перемотка

while stop2 == 0

    turn = [(cos(w)+(1-cos(w))*n3(1)^2) ((1-
cos(w))*n3(1)*n3(2)-sin(w)*n3(3)) ((1-
cos(w))*n3(1)*n3(3)+sin(w)*n3(2)) %матрица поворота вокруг n3
на угол w
            ((1-cos(w))*n3(1)*n3(2)+sin(w)*n3(3)) (cos(f)+(1-
cos(w))*n3(2)^2) ((1-cos(w))*n3(2)*n3(3)-sin(w)*n3(1))
            ((1-cos(w))*n3(3)*n3(1)-sin(w)*n3(2)) ((1-
cos(w))*n3(3)*n3(2)+sin(w)*n3(1)) (cos(w)+(1-
cos(w))*n3(3)^2)];

    n1w = x1f*turn;
    n2w = x2f*turn;
    kappa1 =
abs((xi3(1)*n2w(1)+xi3(2)*n2w(2)+xi3(3)*n2w(3))/(xi3(1)*n1w(1)
+xi3(2)*n1w(2)+xi3(3)*n1w(3)));

    %% Считаем V^2 через y-е Кристоффеля для n1(w)

```

```

nul = [nlw(1)^2 0 0
       0 nlw(2)^2 0
       0 0 nlw(3)^2];

diad1 = [nlw(1)*nlw(1) nlw(1)*nlw(2) nlw(1)*nlw(3)
        nlw(2)*nlw(1) nlw(2)*nlw(2) nlw(2)*nlw(3)
        nlw(3)*nlw(1) nlw(3)*nlw(2) nlw(3)*nlw(3)];

Lambda1 = C1*DM+C2*diad1+C3*nul; %лямбда для n1(w)
[R1,D1] = eig(Lambda1); %R1 - собств векторы n1(w), D1 -
собств значения n1(w)

%находим углы между n1(w) и направлением поляризации,
взятым из R1
Polar1(1) =
acos((nlw(1)*R1(1,1)+nlw(2)*R1(1,2)+nlw(3)*R1(1,3))/(sqrt(nlw(
1)^2+nlw(2)^2+nlw(3)^2)*sqrt(R1(1,1)^2+R1(1,2)^2+R1(1,3)^2));
Polar1(2) =
acos((nlw(1)*R1(2,1)+nlw(2)*R1(2,2)+nlw(3)*R1(2,3))/(sqrt(nlw(
1)^2+nlw(2)^2+nlw(3)^2)*sqrt(R1(2,1)^2+R1(2,2)^2+R1(2,3)^2));
Polar1(3) =
acos((nlw(1)*R1(1,1)+nlw(2)*R1(1,2)+nlw(3)*R1(1,3))/(sqrt(nlw(
1)^2+nlw(2)^2+nlw(3)^2)*sqrt(R1(1,1)^2+R1(1,2)^2+R1(1,3)^2));

if min(Polar1)==Polar1(1) %если минимальный угол для
вектора 1
    Vlsqr=D1(1,1); %квадрат скорости равен
соответствующему собств числу
    U1(1)=R1(1,1); U1(2)=R1(1,2); U1(3)=R1(1,3);
elseif min(Polar1)==Polar1(2) %если минимальный угол для
вектора 2
    Vlsqr=D1(2,2); %квадрат скорости равен соответствующему
собств числу
    U1(1)=R1(2,1); U1(2)=R1(2,2); U1(3)=R1(2,3);

```

```

elseif min(Polar1)==Polar1(3) %если минимальный угол для
вектора 3
    V1sqr=D1(3,3); %квадрат скорости равен соответствующему
собств числу
    U1(1)=R1(3,1); U1(2)=R1(3,2); U1(3)=R1(3,3);
end

%% Считаем V^2 через y-е Кристоффеля для n2(w)

nu2 = [n2w(1)^2 0 0
        0 n2w(2)^2 0
        0 0 n2w(3)^2];

diad2 = [n2w(1)*n2w(1) n2w(1)*n2w(2) n2w(1)*n2w(3)
          n2w(2)*n2w(1) n2w(2)*n2w(2) n2w(2)*n2w(3)
          n2w(3)*n2w(1) n2w(3)*n2w(2) n2w(3)*n2w(3)];

Lambda2 = C1*DM+C2*diad2+C3*nu2; %лямбда для n2(w)
[R2,D2] = eig(Lambda2); %R2 - собств векторы n2(w), D2 -
собств значения n2(w)

%находим углы между n2(w) и направлением поляризации,
взятым из R2
Polar2(1) =
acos((n2w(1)*R2(1,1)+n2w(2)*R2(1,2)+n2w(3)*R2(1,3))/(sqrt(n2w(
1)^2+n2w(2)^2+n2w(3)^2)*sqrt(R2(1,1)^2+R2(1,2)^2+R2(1,3)^2)));
Polar2(2) =
acos((n2w(1)*R2(2,1)+n2w(2)*R2(2,2)+n2w(3)*R2(2,3))/(sqrt(n2w(
1)^2+n2w(2)^2+n2w(3)^2)*sqrt(R2(2,1)^2+R2(2,2)^2+R2(2,3)^2)));
Polar2(3) =
acos((n2w(1)*R2(1,1)+n2w(2)*R2(1,2)+n2w(3)*R2(1,3))/(sqrt(n2w(
1)^2+n2w(2)^2+n2w(3)^2)*sqrt(R2(1,1)^2+R2(1,2)^2+R2(1,3)^2)));

if min(Polar2)==Polar2(1) %если минимальный угол для
вектора 1

```

```

    V2sqr=D2(1,1); %квадрат скорости равен
соответствующему собств числу
    U2(1)=R2(1,1); U2(2)=R2(1,2); U2(3)=R2(1,3);
    elseif min(Polar2)==Polar2(2) %если минимальный угол для
вектора 2
    V2sqr=D1(2,2); %квадрат скорости равен соответствующему
собств числу
    U2(1)=R2(2,1); U2(2)=R2(2,2); U2(3)=R2(2,3);
    elseif min(Polar2)==Polar2(3) %если минимальный угол для
вектора 3
    V2sqr=D1(3,3); %квадрат скорости равен
соответствующему собств числу
    U2(1)=R2(3,1); U2(2)=R2(3,2); U2(3)=R2(3,3);
    end

kappa2 = sqrt(V2sqr/V1sqr);

%% Проверка равенства kappa1 и kappa2
if or(abs(kappa1-kappa2)<=dkappa, t>tmax)
    stop2 = 1;
    n1 = n1w;
    n2 = n2w;
    t = t+1;
    kappa = (kappa1+kappa2)/2;
else
    t = t+1;
    w = w+dw;
end
end
end

```

## Приложение Б

### Расчетная информация характеристик упругого поля ДЦЗ

$\theta$ (°)	$N_{w2}$ (1)	$N_{w2}$ (2)	$\xi_1$	$\xi_2$	$S'_2$	$\delta'$	$S'_2 \delta'$
-158	0.469194 0.469194 0.748140 [558] <sub>y</sub>	0.502325 0.502325 0.703804 [557] <sub>y</sub>	0.706041 0.706041 -0.054877	0.038804 0.038804 0.998493	1	-0.29613	-0.29613
-153	0.558595 0.558595 0.613142 [10 10 11] <sub>y</sub>	0.608854 0.608854 0.508520 [665] <sub>y</sub>	0.692131 0.692131 -0.204718	0.144757 0.144757 0.978821	0.90005	0.26527	0.23876
<b>-151.5</b>	0.587123 0.587123 0.557291 [111] <sub>y</sub>	<b>0.639520</b> <b>0.639520</b> <b>0.426649</b> [332] <sub>y</sub>	0.682594 0.682594 -0.26102	0.184570 0.184570 0.965333	0.83381	0.42746	0.35642
<b>-148.8</b>	<b>0.639058</b> <b>0.639058</b> <b>0.428030</b> [332] <sub>y</sub>	0.686839 0.686839 0.237703 [331] <sub>y</sub>	0.653414 0.653414 -0.382231	0.270278 0.270278 0.924067	0.69567	0.67838	0.47193
<b>-148.4</b>	0.646507 0.646507 0.405038 [885] <sub>y</sub>	<b>0.692141</b> <b>0.692141</b> <b>0.204652</b> [10 10 3] <sub>y</sub>	0.647281 0.647281 -0.402560	0.284653 0.284653 0.915394	0.67461	0.70993	0.47892
<b>-147.3</b>	0.665965 0.665965 0.336127 [221] <sub>y</sub>	0.703014 0.703014 0.107440 [771] <sub>y</sub>	0.627340 0.627340 -0.461399	0.326258 0.326258 0.887193	0.617446	0.78810	0.48661
<b>-145.5</b>	<b>0.691919</b> <b>0.691919</b> <b>0.206147</b> [10 10 3] <sub>y</sub>	0.705592 0.705592 0.065427 [11 11 1] <sub>y</sub>	0.583781 0.583781 -0.564269	0.398998 0.398998 0.825591	0.52839	0.88884	0.46962
-140	0.690051 0.690051 -0.218308 [10 10 3] <sub>y</sub>	0.617461 0.617461 -0.487322 [5 5 -4] <sub>y</sub>	0.392635 0.392635 -0.83167	0.588080 0.588080 -0.487322	0.30546	1	0.30546